

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA**

CARACTERIZAÇÃO DE BIO-ÓLEOS OBTIDOS POR PIRÓLISE RÁPIDA DE SERRAGEM DE LIGNOCEL E DE BAGAÇO DA CANA-DE-AÇÚCAR E AVALIAÇÃO DA INFLUÊNCIA DO USO DO CATALISADOR NOS PRODUTOS OBTIDOS PELA PIRÓLISE CATALÍTICA DO BAGAÇO DA CANA-DE-AÇÚCAR EMPREGANDO A GC×GC/TOFMS

DANIELA DAL MOLIN

Abril de 2015.

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA - PPGQ**

DANIELA DAL MOLIN

CARACTERIZAÇÃO DE BIO-ÓLEOS OBTIDOS POR PIRÓLISE RÁPIDA DE SERRAGEM DE LIGNOCEL E DE BAGAÇO DA CANA-DE-AÇÚCAR E AVALIAÇÃO DA INFLUÊNCIA DO USO DO CATALISADOR NOS PRODUTOS OBTIDOS PELA PIRÓLISE CATALÍTICA DO BAGAÇO DA CANA-DE-AÇÚCAR EMPREGANDO A GCxGC/TOFMS

Tese apresentada como requisito parcial
para obtenção do título de Doutor em Química.

Orientadora: Prof^a Dr^a Elina Bastos Caramão

Abril de 2015.

A presente Tese foi realizada inteiramente pela autora, exceto as colaborações, às quais serão devidamente citadas nos agradecimentos, no período de agosto de 2010 a março de 2015, no Instituto de Química da Universidade Federal do Rio Grande do Sul sob orientação da Profª Drª. Elina Bastos Caramão.



Profª Drª Elina Bastos Caramão
Orientadora



Daniela Dal Molin
Doutora

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho a minha família, em especial ao meu marido, que sempre estiveram ao meu lado, dando apoio e incentivo para sempre seguir em frente.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, gostaria de agradecer pelo maior presente que Deus pode nos dar: a **VIDA**.

A concretização deste objetivo foi alcançada pela ajuda de várias pessoas, que contribuíram das mais diversas formas: ajudando nas tarefas de laboratório, discutindo os resultados, dando sugestões, interpretando os diagramas, discutindo sobre GC, mas também dando força nos momentos mais difíceis. É possível que eu não mencione todas essas pessoas aqui, e por isso, de maneira geral, gostaria de agradecer a todos, que de alguma maneira contribuíram para a realização deste trabalho. Agradeço em especial:

À minha orientadora, Dra Elina B. Caramão, pela excelente oportunidade que me deste e, acima de tudo, ter acreditado em mim. Obrigada pela orientação e por todos os ensinamentos.

A professora Cláudia Zini, por ter me ajudado a escrever o projeto do meu doutorado sanduíche que foi submetido à Brigham Young University e também pela ajuda nos contatos com o professor Milton Lee.

A professora Rosângela Assis Jacques pelas colaborações prestadas.

Ao professor Milton Lee, da Brigham Young University, pela oportunidade de eu realizar as pesquisas em seu laboratório, pelo apoio técnico e orientações. Foi um período de muita aprendizagem e também de fazer novos amigos, como a Sonika e a Jie.

Aos meus queridos colegas e amigos de laboratório, em especial a Janaína Barbará, Gabriela Maciel, Michele Cunha, Anaí Loreiro, Jaderson Shneider, Débora Tomasini e Thiago Bjerk, pela ajuda e apoio em todos os momentos que eu precisei.

Aos antigos colegas do LAAO, em especial a Silvana Moraes, Liliane Gruber, Márcia Brasil, Candice Faccini e Flaviana Damasceno, por toda a ajuda e pelo companheirismo durante esta jornada.

À minha querida colega e amiga Juliana Macedo, por todas as explicações sobre GC×GC, amizade, incentivo e ideias.

Ao meu grande amigo Fernando Fontanive que nunca mediu esforços para me ajudar.

Aos meus amigos de longa data, Fabiane Bartz, Lucélia, Paulinha, Silvane e Juliane pelos momentos de descontração.

À minha grande amiga Micheli Janisch que é meu verdadeiro anjo da guarda.

À toda a família Mergen, minha querida sogra Celita, o Sérgio, a Cristiani e o Tiago que sempre estiveram dando força e incentivo.

À minha família, minha maravilhosa mãe, meu pai e meus irmãos pelo carinho incondicional e apoio em todas as horas.

Ao meu amor, Cristian Mergen, uma pessoa incrível que tive a bênção de conhecer e dividir todos os momentos da minha vida. Obrigada por todo amor, paciência, compreensão, por entender os momentos de ausência e sempre dando força e incentivo.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

PRODUÇÃO CIENTÍFICA GERADA DURANTE O DOUTORADO

a) Trabalhos apresentados em congressos internacionais:

1. GRUBER, L. D. A.; GELLER, A. M.; BOTTEGA, D. P.; **MOLIN, D. D.**; Damasceno, F. C.; Guimaraes, R. C.; Gomes, A. O.; ZINI, C. A.; CARAMAO, E. B. Caracterização de ácidos naftênicos em águas residuais de torres de destilação. 2010.
2. JULIANA MACEDO DA SILVA; **DANIELA DAL MOLIN**; MARCELO VIEIRA MIGLIORINI; MARIA ELISABETE MACHADO; MARIA SILVANA ARANDA MORAES; ELINA BASTOS CARAMÃO. Determinação de compostos nitrogenados em alcatrão de carvão através da GC x GC/TOFMS utilizando-se dois conjuntos convencionais de colunas cromatográficas. 2012.
3. GABRIELA PEREIRA DA SILVA MACIEL; **MOLIN, D. D.**; JANAÍNA A. BARBARÁ; MARIA ELISABETE MACHADO; ROSÂNGELA ASSIS JACQUES; ELINA B. CARAMÃO. Characterization of aqueous phase from pyrolysis of sugar cane straw by GCxGC/TOFMS. 2012.
4. **MOLIN, D. D.**; J.A. BARBARÁ; MICHELE ESPINOSA DA CUNHA; G.P. da S. MACIEL; L. D. GRUBER; A. L. dos SANTOS; H. GEHLEN; G. M. dos Santos; ELINA B. CARAMÃO. Pyrolysis of Sugar Cane Straw: A Complete Study of Products by GCxGC/TOF/MS. 2012.
5. JULIANA M. SILVA; MARIA ELISABETE MACHADO; GABRIELA P.S. MACIEL; **DANIELA DAL MOLIN**; JADERSON K. SCHNEIDER; MÁRCIA BRASIL; ELINA B. CARAMÃO. Speciation of Nitrogen Polyaromatic Compounds (NPAC) in a Coal Tar Sample by Comprehensive Two-Dimensional Gas Chromatography Coupled to Quadrupole Mass Spectrometry without Pre-Fractionation. 2014.
6. **DANIELA DAL MOLIN**; JULIANA M. SILVA; ANDREA PINHO; FÁBIO LEAL MENDES; ELINA B. CARAMÃO. Comparison of Bio-Oils Obtained from Catalytic and Non-Catalytic Pyrolysis of Sugar Cane Bagasse. 2014.
7. JULIANA M. SILVA; MARIA SILVANA A. MORAES; MARCELO V. MIGLIORINI; **DANIELA DAL MOLIN**; MARIA ELISABETE MACHADO; ELINA B. CARAMÃO. Analysis of nitrogen-containing compounds in coal tar without pre fractionation by GCxGC/TOFMS. 2014.
8. **DANIELA DAL MOLIN**; MICHELE ESPINOSA DA CUNHA; JULIANA M. SILVA; ANDREA PINHO; FÁBIO L. MENDES; ELINA B. CARAMÃO. Avaliação da composição química da fase aquosa do bio-óleo obtido por pirólise catalítica. 2014.

b) Artigos submetidos:

1. **DANIELA DAL MOLIN**, JULIANA MACEDO DA SILVA, GABRIELA PEREIRA DA SILVA MACIEL, ANDREA R. PINHO, FÁBIO LEAL MENDES, ELINA BASTOS CARAMÃO, Fractionation as a tool for the comprehensive two dimensional gas chromatography (GCxGC/TOFMS) analysis of the pyrolytic products of sawdust, Energy & Fuels.

c) Artigos publicados:

1. DA SILVA, JULIANA M.; MACHADO, MARIA ELISABETE; MACIEL, GABRIELA P.S.; **DAL MOLIN, DANIELA**; CARAMÃO, ELINA B. Speciation of Nitrogen-Containing Compounds in an Unfractionated Coal Tar sample by Comprehensive Two-Dimensional Gas Chromatography Coupled to Time-of-Flight Mass Spectrometry. Journal of Chromatography, 1373, 159-168, 2014.

SUMÁRIO

	Pag.
DECLARAÇÃO DE AUTORIA	II
DEDICATÓRIA	III
AGRADECIMENTOS	IV
PRODUÇÃO CIENTÍFICA GERADA DURANTE O DOUTORADO	VI
a) Trabalhos apresentados em congressos internacionais:	VI
b) Artigos submetidos:	VI
c) Artigos publicados:	VI
SUMÁRIO	VII
LISTA DE FIGURAS	IX
LISTA DE TABELAS	XIII
LISTA DE SIGLAS E ABREVIACÕES	XIV
RESUMO	XVI
ABSTRACT	XVII
1.INTRODUÇÃO	1
1.1 OBJETIVOS	3
1.1.1 Objetivo geral	3
1.1.2 Objetivos específicos	4
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	5
2.1 Biomassa	6
2.1.1 Biomassa de serragem e de bagaço de cana-de-açúcar	8
2.2 Processos termoquímicos de conversão da biomassa	10
2.2.1 Pirólise rápida	12
2.2.1.1 Pirólise rápida catalítica	13
2.3 Bio-óleo	19
2.3.1 Aplicações do bio-óleo e da sua respectiva fase aquosa	20
2.4 Fracionamento	25
2.5 Cromatografia Gasosa Bidimensional Abrangente (GCxGC)	29
2.6 Estudos sobre bio-óleo no Brasil	33
3 PARTE EXPERIMENTAL	37
3.1 Amostras	38
3.2 Materiais e reagentes	38
3.3 Processo de pirólise das biomassas	39
3.4 Fracionamento das amostras de bio-óleo	39
3.5 Métodos de Extração dos Compostos Orgânicos da Fase Aquosa	41
3.5.1 Extração líquido-líquido (LLE)	41
3.5.2 Extração em fase sólida (SPE)	41
3.5.3 Rendimento dos extratos	41

3.6 Análises das amostras através da técnica GC×GC/TOFMS	42
3.6.1 Análise do bio-óleo de serragem, das suas frações e dos extratos orgânicos da respectiva fase aquosa	42
3.6.2 Análise do bio-óleo de bagaço de cana-de-açúcar, das suas frações e dos extratos orgânicos das respectivas fases aquosas	44
3.7 Processamento dos dados e classificação dos compostos	44
3.8 Determinação por Índice de Retenção com programação linear de temperatura (LTPRI)	46
3.9 Resumo geral da parte experimental	47
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES	49
4.1 Rendimento	50
4.1.1 Rendimento do fracionamento do bio-óleo e da extração dos compostos orgânicos da fase aquosa do bio-óleo proveniente da serragem	50
4.1.2 Rendimento do fracionamento do bio-óleo e da extração dos compostos orgânicos da fase aquosa do bio-óleo proveniente do bagaço da cana-de-açúcar	51
4.2 Análise das amostras via GC×GC/TOFMS	53
4.2.1 Análise do bio-óleo de serragem	53
4.2.1.1 Análise do bio-óleo de serragem e das suas frações obtidas com o fracionamento PLC	53
4.2.1.2 Detalhamento das principais classes de compostos no bio-óleo bruto de serragem e nas suas frações obtidas com o fracionamento	60
4.2.1.3 Análise semiquantitativa dos compostos majoritários nas frações do bio-óleo de serragem e suas frações	72
4.2.1.4 Análise dos extratos orgânicos da fração aquosa do bio-óleo de serragem	76
4.2.2 Análise dos bio-óleos do bagaço da cana-de-açúcar	82
4.2.2.1 Análise das frações dos bio-óleos do bagaço de cana-de-açúcar obtidas com o fracionamento PLC	87
4.2.2.2 Detalhamento das principais classes de compostos do bio-óleo bruto do bagaço de cana-de-açúcar e das suas frações obtidas com o fracionamento	94
4.2.2.3 Análise semiquantitativa dos compostos majoritários do bio-óleo do bagaço de cana-de-açúcar catalítico e não catalítico e em suas frações	105
4.2.2.4 Análise dos extratos orgânicos das fases aquosas dos bio-óleos do bagaço de cana-de-açúcar catalítico e não catalítico	110
4.3 Resumo dos Principais Resultados	116
5. CONCLUSÕES	124
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	127
7. ANEXOS	139

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1: Representação esquemática das principais moléculas que dão origem a celulose	7
Figura 2: Representação da estrutura da hemicelulose.	7
Figura 3: Estrutura da lignina. As estruturas em destaque (pontilhado) representam as unidades de repetição. (Adaptado de Mohan <i>et al.</i> 2006).	8
Figura 4: Estrutura da zeólita ZSM-5 (a) e Unidade pentasil (b).	15
Figura 5: Aplicações do bio-óleo a partir da pirólise rápida (Adaptado de Bridgwater, 2006).	20
Figura 6: Esquema do sistema GCxGC com detalhe do modulador com duplo jato. Em a) (1) injetor, (2) primeira coluna, (3) modulador, (4) segunda coluna e (5) detector. Em b) Representação do processo de modulação.	30
Figura 7: Sistema de fracionamento em coluna aberto das amostras de bio-óleo.	40
Figura 8: Fluxograma do preparo das amostras de bio-óleo para análise por GCxGC/TOFMS.	47
Figura 9: Fluxograma do preparo das amostras dos bio-óleos provenientes da biomassa bagaço de cana-de-açúcar para análise por GCxGC/TOFMS.	48
Figura 10: Diagramas de cores obtidos por GCxGC/TOFMS do bio-óleo de serragem e das suas frações obtidas pelo fracionamento PLC-6. a) Bio-óleo bruto; b)BO SE F1; c)BO SE F2; d)BO SE F3; e)BO SE F4; f)BO SE F5. <i>Condições cromatográficas descritas no item 3.6.1</i>	56
Figura 11: Distribuição número de compostos identificados e as suas respectivas áreas percentuais para o bio-óleo e para as suas frações obtidas com o fracionamento, através da análise por GCxGC/TOFMS. a) Distribuição do número de compostos tentativamente identificados. b) Distribuição das áreas percentuais por classe de compostos tentativamente identificados.	60
Figura 12: Gráficos de dispersão para as classes de compostos tentativamente identificadas no bio-óleo bruto de serragem e para as principais subclasses das cetonas e demais classes de compostos tentativamente identificados no bio-óleo bruto de serragem por GCxGC/TOFMS. a) todos os compostos; b) furanonas, indenonas, piranonas.	62
Figura 13: Gráficos de dispersão para as principais subclasses hidrocarbonetos aromáticos e demais classes de compostos identificados na fração BO SE F1 do bio-óleo de serragem por GCxGC/TOFMS. a) todos os compostos; b) hidrocarbonetos aromáticos; c) fenantrenos e antracenos; d) naftalenos.	65
Figura 14: Gráficos de dispersão para as principais subclasses de hidrocarbonetos aromáticos e demais classes de compostos tentativamente identificados na fração BO SE F2 do bio-óleo de serragem por GCxGC/TOFMS. a) todos os compostos; b) hidrocarbonetos aromáticos; c) fenantrenos e antracenos.	66
Figura 15: Gráficos de dispersão para as principais subclasses dos hidrocarbonetos e das cetonas e demais classes de compostos tentativamente	

identificados na fração BO SE F3 do bio-óleo de serragem por GCxGC/TOFMS. a) todos os compostos; b) hidrocarbonetos; c) cetonas.	68
Figura 16: Gráficos de dispersão para as principais subclasses dos fenóis e demais classes de compostos tentativamente identificados na fração BO SE F4 do bio-óleo de serragem por GCxGC/TOFMS. a) todos os compostos; b) todos os fenóis; c) alquil, alil e fenil fenóis.	70
Figura 17: Gráficos de dispersão para as algumas subclasses das cetonas e demais classes de compostos tentativamente identificados na fração BO SE F5 do bio-óleo de serragem por GCxGC/TOFMS. a) todos os compostos; b) cetonas: indanonas; Indanona, C1 Indanona, C2 Indanona, hidroxí Indanona, C1 hidroxí Indanona; c) cetonas: acetofenonas.	71
Figura 18: Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (> 1,0 % em área) no bio-óleo bruto obtido da serragem analisado por GCxGC/TOFMS. O número entre colchetes representa o número de isômeros.	72
Figura 19: Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (> 1,0% em área) na fração BO SE F1 obtida com o fracionamento do bio-óleo de serragem analisado por GCxGC/TOFMS. O número entre colchetes representa o número de isômeros.	73
Figura 20: Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (> 1,0% em área) na fração BO SE F2 obtida com o fracionamento do bio-óleo de serragem analisado por GCxGC/TOFMS. O número entre colchetes representa o número de isômeros.	74
Figura 21: Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (> 1,0% em área) na fração BO SE F3 obtida com o fracionamento do bio-óleo de serragem analisado por GCxGC/TOFMS. O número entre colchetes representa o número de isômeros.	75
Figura 22: Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (> 1,0% em área) na fração BO SE F4 obtida com o fracionamento do bio-óleo de serragem analisado por GCxGC/TOFMS. O número entre colchetes representa o número de isômeros.	76
Figura 23: Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (> 1,0% em área) na fração BO SE F5 obtida com o fracionamento do bio-óleo de serragem analisado por GCxGC/TOFMS. O número entre colchetes representa o número de isômeros.	76
Figura 24: Diagrama de cores obtidos pela análise via GCxGC/TOFMS dos extratos orgânicos da fase aquosa do bio-óleo de serragem. A) Diagrama de cores para os compostos extraídos por LLE. B) Diagrama de cores para os compostos extraídos por SPE.	77
Figura 25: Gráficos de dispersão para as classes de compostos tentativamente identificados na fase aquosa do bio-óleo de serragem por GCxGC/TOFMS. a) LLE; b) SPE.	78
Figura 26: Áreas percentuais dos compostos tentativamente identificados para os extratos obtidos por SPE e LLE da fase aquosa do bio-óleo de serragem através da análise por GCxGC/TOFMS.	79
Figura 27: Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (> 1,0 % em área) presentes por SPE e LLE da fase aquosa do bio-óleo de serragem analisado por GCxGC/TOFMS. nos extratos obtidos	81
Figura 28: Diagramas de cores bidimensionais e tridimensionais obtidos pela	

- análise via GCxGC/TOFMS dos bio-óleos catalítico e não catalítico do bagaço da cana-de-açúcar. Em a) Gráfico tridimensional para o bio-óleo bruto não catalítico (BO BC); b) Diagrama de cores para o bio-óleo bruto não catalítico (BO BC); c) Gráfico tridimensional para o bio-óleo bruto catalítico (BO BC CAT); d) Diagrama de cores para o bio-óleo bruto catalítico (BO BC CAT). 82
- Figura 29: Áreas percentuais dos compostos tentativamente identificados nos bio-óleos brutos (catalítico e não catalítico) do bagaço de cana-de-açúcar obtidos através da análise por GCxGC/TOFMS. 83
- Figura 30: diagramas de cores 3D obtidos pela análise via GCxGC/TOFMS das frações obtidas com o fracionamento dos bio-óleos catalítico e não catalítico do bagaço da cana-de-açúcar. Em a) Fração F1+F2 do bio-óleo não catalítico (BO BC F1+F2); b) Fração F1+F2 do bio-óleo catalítico (BO BC CAT F1+F2); c) Fração 3 do bio-óleo não catalítico (BO BC F3); d) Fração 3 do bio-óleo catalítico (BOBC CAT F3); e) Fração F4+F5 do bio-óleo catalítico (BO BC CAT F4+F5); f) Fração F4+F5 do bio-óleo catalítico (BO BC CAT F4+F5). 88
- Figura 31: Distribuição das áreas percentuais dos compostos tentativamente identificados nos bio-óleos catalítico e não catalítico do bagaço da cana-de-açúcar. Em a) Frações do bio-óleo não catalítico (BO BC); Em b) Frações do bio-óleo catalítico (BO BC CAT). 90
- Figura 32: Gráficos de dispersão para os compostos tentativamente identificados nos bio-óleos brutos catalítico e não catalítico do bagaço de cana-de-açúcar analisados por GCxGC/TOFMS. a) Bio-óleo não catalítico (BOBC); b) Bio-óleo catalítico (BOBC CAT). 95
- Figura 33: Gráficos de dispersão para as classes de compostos tentativamente identificados na fração F1+F2 do bio-óleo não catalítico (BO BC F1+F2). Em a) Todas as classes; b) Todos os hidrocarbonetos c) Hidrocarbonetos saturados e insaturados alifáticos; d) Benzenos, naftalenos, fluorenos, fenantrenos, antracenos, benzofluoreno. 97
- Figura 34: Gráficos de dispersão para as classes de compostos tentativamente identificados na fração F1+F2 do bio-óleo catalítico (BO BC CAT F1+F2). Em a) Todas as classes; b) Hidrocarbonetos aromáticos, saturados e insaturados; c) Benzenos, naftalenos, fluorenos, fenantrenos/antracenos, xantenos e pirenos. 98
- Figura 35: Gráficos de dispersão para as classes de compostos tentativamente identificados na fração F3 do bio-óleo não catalítico (BO BC). Em a) Todas as classes; b) Hidrocarbonetos aromáticos, saturados e insaturados; c) Aldeídos e ésteres saturados e insaturados. 100
- Figura 36: Gráficos de dispersão para as classes de compostos tentativamente identificados na fração F3 do bio-óleo não catalítico (BO BC CAT). Em a) Todas as classes; b) Subclasses das cetonas; c) Principais subclasses dos fenóis. 101
- Figura 37: Gráficos de dispersão para as classes de compostos tentativamente identificados na fração F4+F5 do bio-óleo não catalítico (BO BC). Em a) Todas as classes; b) Cetonas; c) Principais subclasses dos fenóis. 103
- Figura 38: Gráficos de dispersão para as classes de compostos tentativamente identificados na fração F4+F5 do bio-óleo catalítico (BO BC CAT). Em a) Todas as classes; b) Cetonas cíclicas e alifáticas; c) Principais subclasses dos fenóis. 105
- Figura 39 – Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (>1,0% em área) nos bio-óleos catalítico e não catalítico do bagaço de cana-de-açúcar. Em a) Bio-óleo bruto obtido a partir da pirólise não catalítica do bagaço da cana-de-açúcar (BO BC); Em b) Bio-óleo bruto obtido a partir da pirólise catalítica do

bagaço da cana-de-açúcar (BO BC CAT).	106
Figura 40 – Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (>1,0% em área) nas frações do bio-óleo não catalítico (BO BC). Em a) Fração BO BC F1+F2; b) Fração BO BC F3; c) Fração BO BC F4+F5.	108
Figura 41 – Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (>1,0% em área) nas frações do bio-óleo catalítico (BO BC CAT). Em a) Fração BO BC CAT F1+F2; b) Fração BO BC CAT F3; c) Fração BO BC CAT F4+F5.	110
Figura 42: Diagramas de cores bidimensional e tridimensional obtidos via GCxGC/TOFMS para os compostos presentes nos extratos orgânicos da fase aquosa dos bio-óleos catalítico e não catalítico. Em a) Diagrama bidimensional para o extrato orgânico da fase aquosa do bio-óleo não catalítico (FA BC); b) Diagrama tridimensional para o extrato orgânico da fase aquosa do bio-óleo não catalítico (FA BC); c) Diagrama bidimensional para o extrato orgânico da fase aquosa do bio-óleo catalítico (FA BC CAT); d) Diagrama tridimensional para o extrato orgânico da fase aquosa do bio-óleo catalítico (FA BC CAT).	111
Figura 43: Gráficos de dispersão para os extratos orgânicos das fases aquosas dos bio-óleo obtidos a partir da pirólise catalisada e não catalisada do bagaço da cana-de-açúcar. Em a) Extrato da fase aquosa do bio-óleo não catalítico (FA BC); Em b) Extrato orgânico da fase aquosa do bio-óleo catalítico (FA BC CAT).	112
Figura 44: Distribuição da área percentual dos compostos tentativamente identificados nos extratos orgânicos das fases aquosas dos bio-óleos catalítico e não catalítico do bagaço da cana-de-açúcar.	113
Figura 45 – Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (>1,0% em área) nos extratos orgânicos obtidos por LLE das fases aquosas dos bio-óleos do bagaço de cana-de-açúcar. Em a) Extrato para fase aquosa do bio-óleo não catalítico (FA BC); b) Extrato para fase aquosa do bio-óleo catalítico (FA BC CAT).	114
Figura 46: Distribuição da área percentual dos compostos tentativamente identificados no bio-óleo, nas suas frações obtidas com o fracionamento e nos extratos SPE e LLE da fase aquosa do bio-óleo de serragem.	119
Figura 47: Distribuição do número de compostos tentativamente identificados no bio-óleo, nas suas frações obtidas com o fracionamento e nos extratos SPE e LLE da fase aquosa do bio-óleo de serragem.	120
Figura 48: Distribuição da área percentual dos compostos tentativamente identificados nos bio-óleos, nas suas frações obtidas com o fracionamento e nos extratos LLE das fases aquosas do bio-óleos de bagaço de cana-de-açúcar.	121
Figura 49: Distribuição do número de compostos tentativamente identificados nos bio-óleos, nas suas frações obtidas com o fracionamento e nos extratos LLE das fases aquosas do bio-óleos de bagaço de cana-de-açúcar.	122
Figura 50: Distribuição das áreas percentuais das cetonas, fenóis e hidrocarbonetos tentativamente identificadas nos bio-óleos brutos analisados (BO SE, BO BG, BO BG CAT) e nas suas respectivas fases aquosas (FA SE LLE, FA SE SPE, FA BG, FA BG CAT).	123

LISTA DE TABELAS

	Pág.
Tabela I: Rendimentos típicos obtidos para diversos tipos de pirólise. (Adaptado de Bridgwater 2006).	12
Tabela II: Trabalhos que avaliaram o melhoramento do bio-óleo.	23
Tabela III – Parâmetros cromatográficos do método para a análise do bio-óleo bruto e suas frações.	43
Tabela IV – Condições do modulador e do programa de temperatura do forno utilizadas na análise dos extratos orgânicos da fase aquosa.	43
Tabela V – Rendimentos do fracionamento PLC realizado no bio-óleo e da extração dos compostos orgânicos da fase aquosa do bio-óleo proveniente da serragem.	51
Tabela VI - Rendimentos do fracionamento PLC realizado no bio-óleo catalítico (BO BC CAT), não catalítico (BO BC) e da extração dos compostos orgânicos da fase aquosa dos bio-óleos provenientes do bagaço da cana-de-açúcar.	52
Tabela VII: Resumo dos resultados da análise GCxGC/TOFMS do bio-óleo de serragem e das suas frações obtidas pelo fracionamento PLC.	53
Tabela VIII: Número de picos tentativamente identificados, percentual de picos e percentual em área para o bio-óleo de serragem e para as suas frações obtidas pelo fracionamento PLC-6, analisados por GCxGC/TOFMS.	59
Tabela IX: Número de picos tentativamente identificados (totais e por IR), percentual de picos (totais e por IR) e percentual em área (totais e por IR), para os bio-óleos brutos catalítico e não catalítico do bagaço de cana-de-açúcar, analisados por GCxGC/TOFMS.	84
Tabela X: Resumo dos resultados obtidos da análise por GCxGC/TOFMS das frações do bio-óleo não catalítico do bagaço de cana-de-açúcar.	91
Tabela XI: Resumo dos resultados obtidos da análise por GCxGC/TOFMS das frações do bio-óleo catalítico do bagaço de cana-de-açúcar.	92
Tabela XII: Número de picos tentativamente identificados (totais e por IR), percentual de picos (totais e por IR) e percentual em área (totais e por IR), para os extratos orgânicos das fases aquosas dos bio-óleos catalítico e não catalítico do bagaço de cana-de-açúcar, analisados por GCxGC/TOFMS.	115

LISTA DE SIGLAS E ABREVIÇÕES

LTPRI	Índice de Retenção Linear com Temperatura Programada
NIST	Instituto Nacional de Padrões e Tecnologia – do inglês: “ <i>National Institute of Standards and Technology</i> ”
CONAB	Companhia Nacional de Abastecimento
ZSM-5	<i>Zeolite Socony Mobil-5</i>
MFI	<i>Mobil five</i>
AI-MCM	Peneira molecular com alumínio
AI-MSU-F	Aluminossilicato mesoestruturado
H-ZSM-5	<i>Zeolite Socony Mobil-5</i> ((forma protonada)
E-Cat	Catalisador comercial de equilíbrio
BTX	Benzeno, tolueno e xileno
MMA	Ministério do Meio Ambiente
GC/MS	Cromatografia gasosa associada a detector de espectrometria de massas – do inglês “ <i>gas chromatography/mass spectrometry</i> ”
GC/qMS	Cromatografia gasosa acoplada a detector de espectrometria de massas com analisador quadrupolar– do inglês “ <i>gas chromatography/quadrupole mass spectrometry</i> ”
qMS	Espectrômetro de massas com analisador quadrupolar– do inglês “ <i>quadrupole mass spectrometry</i> ”
GC-FID	Cromatografia gasosa com detector de ionização em chama – do inglês “ <i>gas chromatography-flame ionization detector</i> ”
FID	Detector por ionização em chama – do inglês “ <i>gas chromatography-flame ionization detector</i> ”
GCxGC	Cromatografia gasosa bidimensional abrangente – do inglês “ <i>two-dimensional gas chromatography</i> ”
GCxGC/TOFMS	Cromatografia gasosa bidimensional abrangente associada a espectrometria de massas por tempo de voo – do inglês “ <i>two-dimensional gas chromatography/time-of-flight mass spectrometry</i> ”
TOFMS	Analisador de massa por tempo de voo - do inglês “ <i>two-dimensional gas chromatography/time-of-flight mass spectrometry</i> ”
GCxGC/qMS	Cromatografia gasosa bidimensional abrangente acoplada a um analisador de massas quadrupolar – do inglês “ <i>two-dimensional gas chromatography/quadrupole mass spectrometry</i> ”
Py-GC/MS	Pirolisador acoplado a um cromatógrafo gasoso com espectrômetro de massas – do inglês “ <i>Pyrolysis gas chromatography mass spectrometry</i> ”
FCC	Catalisador de craqueamento fluidizado (do inglês “ <i>Fluid Catalytic Cracking</i> ”)
HLB	balanço hidrofílico lipofílico
THF	Tetrahidrofurano
LAAO	Laboratório de Química Analítica Ambiental e Oleoquímica
FT-IR	Espectroscopia no infravermelho com transformada de Fourier – do inglês “ <i>Fourier Transform Infrared Spectrometry</i> ”
RMN	Espectrometria de ressonância magnética nuclear ¹³ C – do inglês “ <i>nuclear magnetic resonance</i> ”
ΔT	Diferença de temperatura entre os fornos primário e secundário
A	Área
¹ D	Primeira dimensão
² D	Segunda dimensão
¹ D-GC	Cromatografia gasosa monodimensional - do inglês “ <i>gas chromatography</i> ”

SPE	Extração em fase sólida – do inglês “ <i>phase solid extraction</i> ”
LLE	Extração líquido-líquido – do inglês “ <i>liquid liquid extraction</i> ”
SPME	Microextração em fase sólida – do inglês “ <i>Solid Phase Micro-Extraction</i> ”
HDO	Hidrodesoxigenado
ETE	Estação de tratamento de efluentes
P_M	Período de modulação
S	Similaridade
1t_R	Tempo de retenção na primeira dimensão
2t_R	Tempo de retenção na segunda dimensão
FB	Reator de leito fixo
BFB	Leito fluidizado borbulhante
FAAL	Fração aquosa alcalina
FO	Fase oleosa
FA	Fase aquosa
BO	Bio-óleo
DCM	Diclorometano
PLC	Cromatografia líquida preparativa – do inglês “ <i>preparative liquid chromatography</i> ”.
TIC	Cromatograma do íon total - do inglês “ <i>total ion current chromatogram</i> ”
EIC	Cromatograma do íon extraído - do inglês “ <i>extracted ion current chromatogram</i> ”
UFRGS	Universidade Federal do Rio Grande do Sul
UFRJ	Universidade Federal do Rio de Janeiro
BO SE	Bio-óleo de serragem
FA SE	Fase aquosa do bio-óleo de serragem
BO BC	Bio-óleo de bagaço de cana-de-açúcar
FA BC	Fase aquosa do bio-óleo de cana-de-açúcar
BO BC CAT	Bio-óleo catalítico de bagaço de cana-de-açúcar
FA BC CAT	Fase aquosa do bio-óleo catalítico de bagaço de cana-de-açúcar

RESUMO

A utilização de resíduos agrícolas como fonte de biomassa para a produção de bio-óleo é muito relevante, principalmente para o Brasil, que é um grande produtor agrícola. Para avaliar as potencialidades do bio-óleo torna-se necessário um profundo conhecimento da composição química do mesmo. Entretanto, este apresenta elevada complexidade química. Técnicas de fracionamento representam uma alternativa para diminuir a complexidade da amostra e também separar os compostos em frações, de acordo as suas polaridades. Neste trabalho foi analisado a composição química de bio-óleos produzidos a partir da pirólise rápida de serragem de lignocel e de bagaço de cana-de-açúcar e avaliado a influência do uso de catalisador sobre a composição dos produtos da pirólise do bagaço de cana-de-açúcar. Para tal, foi realizado um fracionamento dos bio-óleos baseado na cromatografia líquida preparativa em coluna aberta e extração dos compostos orgânicos presentes nas fases aquosas dos respectivos bio-óleos. A análise dos compostos foi realizada empregando a GC×GC/TOFMS. Utilizou-se também o sistema de LTPRI (Índice de Retenção com Programação Linear de Temperatura) para a confirmação da identificação de alguns compostos nos bio-óleos, nas frações e nos extratos orgânicos das fases aquosas do bio-óleo. De acordo com os resultados, os bio-óleos apresentaram composição química muito parecida, com grande variedade de compostos, principalmente hidrocarbonetos e compostos oxigenados como cetonas e fenóis. O fracionamento dos bio-óleos promoveu melhor seletividade dos compostos nas frações, permitindo a identificação de um maior número de compostos. As fases aquosas dos bio-óleos apresentaram principalmente compostos derivados de fenóis e de cetonas. Em relação ao uso do catalisador ZSM-5 no processo de pirólise do bagaço da cana-de-açúcar, o bio-óleo obtido apresentou menor quantidade de compostos oxigenados e maior quantidade de hidrocarbonetos aromáticos. A utilização da técnica GC×GC, aliada com os gráficos de dispersão (Microsoft Excel™) permitiu uma classificação espacial dos constituintes das amostras que favorece a caracterização completa de amostras complexas, como é o caso do bio-óleo.

ABSTRACT

The use of agricultural waste as a source of biomass for bio-oil production is very relevant, especially for Brazil, which is a major agricultural producer. To evaluate the potential of bio-oil, a thorough knowledge of the chemical composition of the same is necessary. However, these samples show a high chemical complexity. Fractionation techniques represent an alternative to reduce the complexity of the sample, but also to separate the compounds into fractions according to their polarities. This study evaluated the chemical composition of bio-oils produced from the fast pyrolysis of eucalyptus sawdust and sugar cane bagasse, and evaluated the influence of catalyst use on the composition of pyrolysis products. A fractionation of bio-oils based on preparative liquid chromatography open column and extraction of organic compounds in aqueous phases of their bio-oils was executed. The analysis of the compounds was done by GCxGC/TOFMS. The LTPRI (linear temperature programmed retention index) system was used to confirm the identification of some compounds in the bio-oils, in the fractions of the organic extracts and aqueous phases of the bio-oil. According to the results, the bio-oils had very similar chemical composition, with a variety of compounds, especially hydrocarbons and oxygenated compounds, such as ketones and phenols. Fractionation of bio-oils provided better selectivity of the compounds of the fractions, permitting the identification of a larger number of compounds. Both the aqueous phases derived of the bio-oils showed mainly phenols and ketones compounds. Regarding the use of ZSM-5 catalyst in the pyrolysis process of bagasse from cane sugar, the bio-oil showed a lower amount of oxygen compounds and larger amount of aromatic hydrocarbons. The use of GCxGC technique, coupled with the scatter plots allowed a classification of the spatial components of the sample, which is essential for full characterization of complex samples.

1 INTRODUÇÃO

1. INTRODUÇÃO

A biomassa consiste em uma importante fonte renovável e abundante para a obtenção de energia no Brasil, pois este é um grande produtor agrícola. Entre as biomassas, destaca-se a cana de açúcar que é utilizada para a produção de etanol e açúcar. Apesar de ser uma fonte renovável, apresenta como inconveniente a geração de subprodutos como o bagaço e a palha, que não são totalmente aproveitados pela indústria e constituem resíduos do processo. Outra importante fonte de biomassa residual no Brasil é a oriunda do agronegócio florestal, o país é mundialmente um dos maiores produtores e consumidores de produtos desta origem, o que gera uma grande produção de serragem como resíduo. Tanto o bagaço de cana-de-açúcar quanto a serragem de lignocel (fibras naturais de madeira macia) representam excelentes fontes de biomassa.

Atualmente, a utilização da pirólise rápida para a conversão da biomassa em produtos gasosos, líquidos e sólidos é uma das alternativas mais promissoras para converter a biomassa em produtos de maior valor agregado e energia. O produto líquido obtido neste processo é denominado bio-óleo, o qual apresenta uma mistura complexa de compostos orgânicos, principalmente oxigenados e uma fração aquosa. Entretanto, para avaliar as reais potencialidades do bio-óleo é necessária a caracterização completa e minuciosa do mesmo, inclusive da fase aquosa que pode estar presente em grande quantidade no bio-óleo. Estudos de diferentes biomassas tem revelado uma composição complexa de centenas de compostos de diferentes polaridades. Técnicas de fracionamento como a cromatografia líquida preparativa em coluna aberta, podem ajudar no processo de caracterização e posterior separação de compostos e/ou classes de interesse, pois diminuem a complexidade do bio-óleo, separando os compostos de acordo com suas características.

Associado a atual dependência dos combustíveis a fontes finitas, como o petróleo, está o incentivo aos estudos que visam à obtenção de biocombustíveis e de aditivos a partir do bio-óleo. Entretanto, o maior desafio nesta área encontra-se na composição dos bio-óleos obtidos das biomassas. A presença de um alto percentual de compostos oxigenados

tem dificultado a sua utilização como substituinte ao combustível fóssil. Os compostos oxigenados diminuem o poder calorífico do combustível e potencializam a degradação do bio-óleo, e, além disso, a presença de ácidos orgânicos pode causar corrosão nas tubulações das refinarias. Pesquisas no sentido de isolar estes compostos estão em pleno desenvolvimento e resultados promissores têm sido obtidos com o emprego de catalisadores como as zeólitas. Outra linha de pesquisa quanto ao uso de bio-óleo a partir de fontes renováveis está na obtenção de compostos para insumo na indústria química. Compostos como fenóis e furfural podem ser isolados a partir do bio-óleo. Porém, tanto a produção de combustível quanto a de compostos para a química fina ainda não apresentam métodos de caracterização e separação consolidados e pesquisas tem sido realizadas no sentido de obter métodos mais rápidos e efetivos e menos honorosos para que possam ser aplicadas em grande escala.

Em relação à caracterização de bio-óleos, as técnicas analíticas cromatográficas estão entre as mais empregadas. Destaque para a cromatografia gasosa bidimensional abrangente (GC×GC) que possui alta sensibilidade e oferece melhor resolução quando comparada a cromatografia gasosa monodimensional (¹D-GC). A GC×GC permite a identificação de compostos de forma mais eficiente e rápida em misturas complexas como bio-óleos, fornecendo resultados mais promissores. Entretanto, um vasto campo de pesquisa encontra-se ainda inexplorado, principalmente quando pequenas diferenças são importantes para a caracterização de compostos.

1.1. OBJETIVOS

1.1.1 Objetivo geral

Desenvolver uma metodologia analítica baseada na cromatografia gasosa bidimensional abrangente acoplada à espectrometria de massas por tempo de voo (GC×GC/TOFMS) para avaliar a composição química de bio-óleos e suas respectivas fases aquosas, produzidos a partir da pirólise de serragem de lignocel e de bagaço de cana-de-açúcar, bem como avaliar a influência do uso de catalisador sobre a composição dos produtos obtidos com a pirólise do bagaço da cana-de-açúcar.

1.1.2 Objetivos específicos

- Realizar um fracionamento do bio-óleo bruto de serragem de lignocel baseado na cromatografia líquida preparativa em coluna aberta (PLC) com o intuito de diminuir a complexidade do mesmo.
- Aplicar o fracionamento PLC nos bio-óleos bruto obtido a partir da pirólise catalítica (com ZSM-5) e não catalítica do bagaço da cana-de-açúcar.
- Desenvolver uma metodologia analítica empregando a GCxGC/TOFMS para a análise do bio-óleo bruto de serragem e das suas frações obtidas com o fracionamento PLC deste bio-óleo.
- Desenvolver uma metodologia analítica empregando a GCxGC/TOFMS para a análise dos bio-óleos brutos do bagaço de cana-de-açúcar (catalisado e não catalisado) e das suas frações obtidas com o fracionamento PLC.
- Extrair os compostos orgânicos presentes nas fases aquosas dos bio-óleos avaliados neste trabalho;
- Analisar os extratos orgânicos extraídos das fases aquosas dos bio-óleos através da GCxGC/TOFMS.
- Caracterizar qualitativamente e semiquantitativamente os bio-óleos e suas fases aquosas.
- Avaliar a influência da pirólise catalítica na composição do bio-óleo proveniente do bagaço da cana-de-açúcar.
- Calcular o Índice de Retenção com Programação Linear de Temperatura (LTPRI) para os compostos identificados em todas as amostras provenientes do bagaço da cana-de-açúcar (bio-óleo bruto catalisado e não catalisado, suas respectivas frações e os extratos orgânicos das suas fases aquosas) e comparar o LTPRI encontrado de cada composto com o da literatura com o uso da biblioteca NIST.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Biomassa

A crescente demanda energética em virtude do crescimento populacional e a dependência dos combustíveis fósseis (carvão, petróleo e gás) pelo sistema energético internacional, tem incentivado a busca por fontes de energia renováveis e por processos energeticamente eficientes para a produção sustentável de combustíveis e de produtos químicos.¹ Com essa demanda energética tornaram-se necessárias iniciativas no sentido do uso de fontes renováveis, principalmente para minimizar a exploração desenfreada de reservas naturais e reduzir a instabilidade dos preços do petróleo, além de minimizar os efeitos ambientais negativos, especialmente as emissões de gases que provocam o efeito estufa.²⁻⁵ Nesse contexto, insere-se a biomassa.

Biomassa é o nome dado a toda a matéria viva da terra, mais especificamente, toda matéria orgânica não fossilizada e biodegradável originada a partir de plantas, animais e micro-organismos, composta, principalmente por carbono, hidrogênio oxigênio e nitrogênio.^{8,9} Devido às suas características é considerada a fonte de energia renovável com maior potencial para contribuir com as necessidades energéticas da sociedade moderna nos países desenvolvidos bem nos países em desenvolvimento.^{6,7}

A biomassa vegetal é composta predominantemente por celulose, hemicelulose, lignina e, em menores quantidades, taninos, ácidos graxos, resinas e sais inorgânicos.^{10,11} Entretanto, esta composição pode variar de acordo com a espécie de planta.

A celulose^{12, 13} é um polímero linear de alta massa molecular, formada a partir de reações entre os carbonos de posição 1 e 5 da D-glucose, formando a glucopiranoose, que, por sua vez, através de ligações β -1,4-glicosídicas forma a celulose, conforme **Figura 1**.

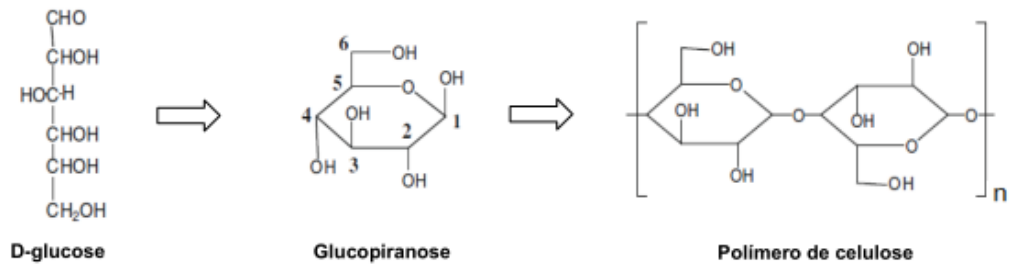


Figura 1: Representação esquemática das principais moléculas que dão origem a celulose

A hemicelulose é um polissacarídeo de composição variável formado por cinco variados açúcares, diferentemente da celulose que é formada por um único açúcar (glucose). Os açúcares presentes são formados por cinco átomos de carbono (xilose e arabinose) e por seis átomos de carbonos (galactose, glucose, e manose). A mais abundante estrutura é o xilano (polímero xilose ligado nas posições 1,4). Devido sua natureza ramificada, a hemicelulose é um polímero amorfo e é facilmente hidrolisada aos seus monômeros originais (açúcares) comparada com a celulose.^{1, 12, 13} A representação da formação da hemicelulose pode ser visualizada na **Figura 2**.

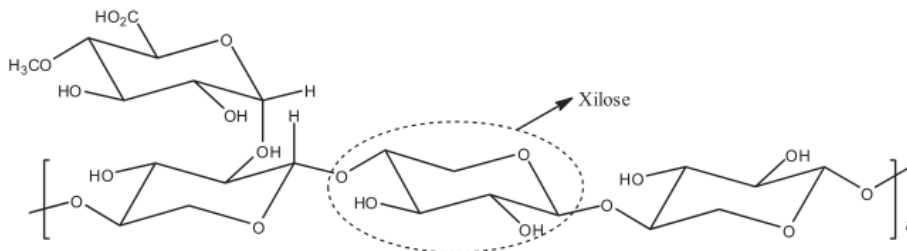


Figura 2: Representação da estrutura da hemicelulose.

A terceira molécula mais abundante na biomassa, a lignina é uma substância polifenólica de estrutura tridimensional altamente ramificada constituída de uma variedade de unidades de fenil-propano substituídas com hidroxilas ou radicais metóxi. Essas unidades de fenil-propano monoméricas exibem a estrutura do cumaril, coniferil (guaiacil) e sinapil (siringil)^{1,14}, conforme **Figura 3**. A lignina quando degradada a massas molares menores pode ser utilizadas na fabricação de espumas de poliuretano, resinas fenólicas, epóxi e como fontes de fenol e etileno.²

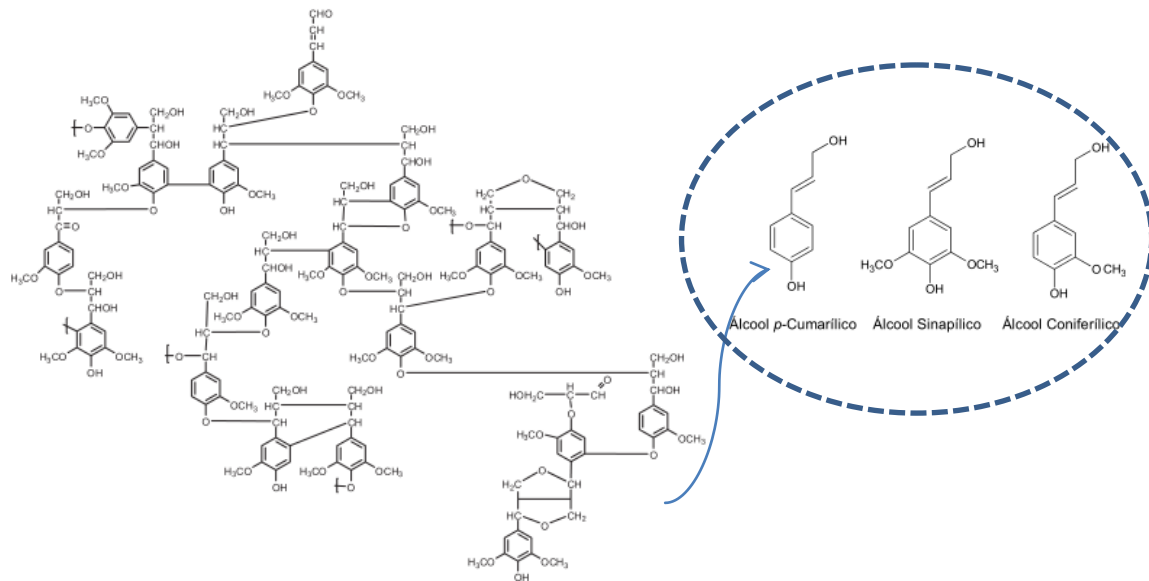


Figura 3: Estrutura da lignina. As estruturas em destaque (pontilhado) representam as unidades de repetição. (Adaptado de Mohan *et al.* 2006).¹⁴

As principais fontes de biomassa incluem resíduos sólidos urbanos, resíduos de animais, de vegetais, de madeira, de indústrias, de processamento de alimentos, da produção agrícola, como também plantas aquáticas e algas.^{1,2,9, 11,15}

2.1.1 Biomassa de serragem e de bagaço de cana-de-açúcar

Entre as fontes de energias renováveis, a biomassa é considerada uma das mais importantes, uma vez que representa uma alternativa adequada e viável para substituir os combustíveis fósseis convencionais. Diferentemente de outras fontes de energia renováveis, como energia eólica, sistema de hidrelétricas e energia solar, os sistemas para a obtenção de energia a partir da biomassa podem ser implantados em qualquer lugar, como por exemplo, onde as plantas são cultivadas. Além do mais, a biomassa pode ajudar a reduzir o aquecimento global quando comparada com uma planta de extração de combustíveis fósseis. As plantas usam e armazenam o CO₂ enquanto crescem. O CO₂ armazenado pela planta é liberado quando o material vegetal é queimado. O replantio de novas culturas utiliza o CO₂ liberado pela queima das plantas fechando desta forma o ciclo do dióxido de carbono.

16

A partir de 2007, a biomassa vem fazendo parte da matriz energética brasileira, como a segunda principal fonte de energia, superada pelo petróleo e derivados.¹⁷ Além do mais, de acordo com o estudo inserido no Plano Nacional de Energia 2030,¹⁷ o Brasil está localizado entre as melhores regiões geográficas para a produção de biomassa, pois de acordo com este estudo, a melhor região do planeta para a produção da biomassa é a faixa tropical e subtropical, entre o Trópico de Câncer e o Trópico de Capricórnio. Esta faixa

abrange alguns países das Américas Central e do Sul, como o Brasil, o continente africano e Austrália. Estes últimos são caracterizados pela existência de áreas desérticas e, portanto, pouco propensas à produção agrícola. O Brasil, além da grande quantidade de terra agriculturável, apresenta solo e condições climáticas adequadas.¹⁷

A cana-de-açúcar constitui a mais abundante fonte de biomassa com tecnologia estabelecida e em pleno uso para a produção de etanol. O Brasil se destaca como o maior produtor mundial de etanol e açúcar obtidos a partir da cana-de-açúcar e o segundo maior produtor mundial de etanol.^{17, 18} De acordo com informações do site da CONAB (Companhia Nacional de Abastecimento), a estimativa de produção de cana-de-açúcar para a safra de 2015 no Brasil é de 654,6 milhões de toneladas, em pouco mais de 9 milhões de hectares.¹⁹ Como consequência da grande produção desta cultura para fins, principalmente energético, tem-se a geração em larga escala de resíduos oriundos desta produção. A parte empregada para a obtenção do etanol e do açúcar é o colmo (caule), sendo o bagaço e a palha, resíduos.^{20, 21} O processamento da cana-de-açúcar fresca produz cerca de 14% (base seca) de palha e 12,5% (base seca) de bagaço. Assim, estima-se a produção de cerca de 91,6 e 81,8 milhões de toneladas de resíduos de palha e bagaço, respectivamente, no período da safra de 2015.²²

A importância dos resíduos gerados no processamento da cana-de-açúcar é evidenciada pelo grande número de trabalhos envolvendo o estudo dessas biomassas na literatura.^{20, 22-25} Szczerbowski *et al.*²² analisaram a composição química do bagaço e da palha de cana em relação ao teor de gluconas (celulose e β -glucona), hemicelulose, lignina e cinzas para avaliar o uso destas biomassas como uma fonte de açúcares fermentáveis (substratos) para bioprocessos. Santos *et al.*²¹ fizeram uma revisão sobre a estrutura da palha de cana-de-açúcar com o intuito de avaliar o seu potencial para a produção de etanol celulósico. Cunha *et al.*²⁰ avaliaram a influência de diferentes pré-tratamentos de hidrólise do bagaço da cana na composição dos produtos gerados pela pirólise dessa biomassa pré-tratada.

Outra fonte de biomassa abundante no Brasil é a gerada no setor florestal. Segundo o Ministério do Meio Ambiente (MMA), o Brasil é um dos maiores produtores e o maior consumidor de produtos de origem florestal no mundo, destinados principalmente, para setores como a siderurgia, a indústria de papéis e embalagens e a construção civil. De acordo com o Programa Nacional de Florestas do MMA, existem oito cadeias produtivas que exploram o patrimônio florestal: chapas e compensados, óleos e resinas, cosméticos, alimentos, carvão, lenha e energia, papel e celulose e madeira e móveis. Com este panorama, tem-se uma grande produção de resíduos florestais.²⁶

De acordo como Nolasco²⁷, resíduo florestal é todo e qualquer material proveniente da colheita ou processamento da madeira e de outros produtos florestais que permanece

sem utilização definida durante o processo, por limitações tecnológicas ou de mercados, sendo descartado durante a produção. Assim como as demais biomassas de fonte vegetal, os resíduos de madeira apresentam majoritariamente lignina e celulose em suas constituições. São heterogêneos, devido à variedade em que se apresentam (sobras de madeira, galhos, tocos, cascas, serragem e raízes) e podem ser classificados como: serragem (resíduo originado da operação de serras, encontrado em todos os tipos de indústria); cepilho (maravalha): resíduo gerado pelas indústrias que adquirem a madeira já transformada e a processam em componentes para móveis, esquadrias, pisos, forros, entre outras; lenha ou cavacos: resíduo de maiores dimensões, gerado em todos os tipos de indústria, composto por costaneiras, aparas, resíduos de topo de tora, restos de lâminas. Os resíduos de serragem podem chegar a 12% do volume total de matéria-prima.²⁶

Tendo em vista o grande volume de resíduos gerados no setor florestal, os mesmos representam uma excelente fonte de biomassa para a produção de energia, combustíveis e/ou produtos de maior valor agregado, pois ajudam a economizar reservas fósseis e com isto impulsionar a pesquisa, atividades sociais e econômicas, principalmente em países onde os recursos petroquímicos são mínimos e as fontes de biomassa são abundantes. Neste sentido, encontram-se na literatura muitos trabalhos com o objetivo de avaliar o potencial dos resíduos de serragem como fonte de biomassa para obtenção de produtos de maior valor agregado e/ou biocombustíveis.^{28 - 32}

O uso de fontes renováveis para obtenção de produtos químicos como bioplásticos, biofertilizantes e biopoliésteres pode compartilhar a demanda com os de origem petroquímica.¹¹ Outro fator a ser considerado, diz respeito à redução no volume de resíduos a serem incinerados e/ou dispostos em aterros, minimizando as causas do efeito estufa.^{11, 33} Além do mais, o emprego da biomassa como fonte para a obtenção de biocombustíveis e de insumos para a indústria química não compete com as culturas alimentares, pois as matérias-primas são os resíduos das culturas que seriam descartados.²⁰ Isto destaca ainda mais a importância de pesquisas que possam viabilizar o total reaproveitamento e uso desses materiais.

2.2 Processos termoquímicos de conversão da biomassa

Os três principais processos termoquímicos utilizados para converter a biomassa em uma forma energética mais útil são a pirólise, a gaseificação e a combustão.³⁴

A combustão é um processo químico pelo qual um material reage com o oxigênio do ar produzindo luz e calor intenso. No caso da combustão da biomassa, o processo ocorre em três estágios: ignição, combustão com chama, do inglês *flaming* e combustão com ausência de chama, do inglês *smoldering*. No segundo estágio, *flaming*, a combustão é mais

eficiente e ocorre a emissão de CO₂, H₂O, N₂, NO_x e SO₂. No terceiro estágio, *smoldering*, processo que ocorre em menor temperatura e ausência de chama, ocorre à emissão de compostos como CO, CH₄ e outros hidrocarbonetos. Os processos envolvidos nesses estágios abrangem diferentes reações químicas e como consequência produzem diferentes produtos.^{35, 36}

A combustão de biomassa é amplamente empregada comercialmente para fornecer calor e energia.^{34, 37-39} O processo possui tecnologias bem estabelecidas e apresenta um pequeno risco para os investidores. O calor produzido pode ser utilizado imediatamente para aquecimento e/ou para a geração de energia.^{34, 37} Entretanto, a emissão de gases, material particulado e o manuseio das cinzas continuam sendo os problemas deste processo.³⁷

A gaseificação é um processo em que a biomassa reage com um agente oxidante, como ar, oxigênio puro ou vapor d'água, produzindo um gás que contém principalmente monóxido de carbono, dióxido de carbono e hidrogênio, além de menores quantidades de metano e nitrogênio. É um processo largamente empregado para produzir calor para aquecer ambientes, gerar vapor em caldeiras e movimentar turbinas geradoras de eletricidade.^{34, 40,41}

A pirólise é um processo de decomposição térmica que ocorre na ausência de oxigênio. A pirólise da biomassa gera produtos no estado gasoso, líquido e sólido. Os rendimentos e a qualidade dos mesmos são influenciados pelas condições operacionais empregadas no processo.³⁴

Dependendo das condições empregadas durante o processo de pirólise, esta pode ser classificada em *pirólise lenta ou carbonização* (favorece a produção de carvão),⁴²⁻⁴⁴ *pirólise tipo gaseificação* (favorecendo a formação de produtos gasosos),^{40, 41, 45} *pirólise rápida ou pirólise moderada* (que proporciona maiores rendimentos de produtos líquidos),⁴⁶⁻⁴⁹ conforme **Tabela I**, que apresenta alguns exemplos do perfil de rendimentos de produtos obtidos para diferentes condições do processo de pirólise de madeira. De modo geral, altas temperaturas de pirólise com longo tempo de residência favorece a formação de gases, enquanto temperaturas moderadas e curto período de residência favorece a formação de produtos líquidos.³⁴

Tabela I: Rendimentos típicos obtidos para diversos tipos de pirólise de madeira. (Adaptado de Bridgwater 2006).³⁴

Processo	Condições operacionais	Líquido (%)	Sólido (%)	Gás (%)
Pirólise lenta	Temperatura baixa, em torno de 400 °C Tempo de residência - horas/dias	30	35	35
Pirólise gaseificação	Temperatura elevada, em torno de 800 °C Tempo de residência dos vapores longo	5	10	85
Pirólise rápida	Temperatura moderada, em torno de 500 °C Tempo de residência dos vapores baixo, em torno de 1 s	75	12	13
Pirólise intermediária	Temperatura moderada, em torno de 500 °C Tempo de residência dos vapores moderados, em torno de 10-20 s	50	20	30

2.2.1 Pirólise rápida

Pirólise rápida é um processo de aquecimento com altas temperaturas, no qual a biomassa é rapidamente aquecida na ausência de oxigênio.⁵⁰⁻⁵² A biomassa se decompõe para gerar vapores, aerossóis e carvão. Após o resfriamento e condensação dos vapores e aerossóis, uma fase líquida é formada.¹⁴

A pirólise rápida é empregada quando se objetiva uma maior obtenção de bio-óleo, o qual pode ser usado para produzir energia e produtos químicos.⁵³ O rendimento do produto líquido pode ser maximizado controlando os parâmetros do processo.³⁴ Entre as características essenciais de um processo de pirólise rápida para produção de líquidos estão:^{34, 53}

- Altas taxas de aquecimento (1000 °C/min,⁵⁴ 600 °C/s⁵⁵) e de transferência de calor;
- Emprego de biomassa finamente moída;
- Temperatura do forno de pirólise controlada em torno de 500 °C;
- Baixo tempo de residência dos vapores no condensador, tipicamente menor que 2s;
- Resfriamento rápido dos vapores formados para gerar o bio-óleo.

O aquecimento e resfriamento rápido produz um líquido de pirólise que é condensado antes que ocorram outras reações secundárias, minimizando as quebras de espécies de peso molecular mais elevado em espécies menores e mais voláteis. Altas taxas de aquecimento minimizam a formação de carvão.¹⁴

O processo de pirólise rápida compreende uma etapa de secagem da biomassa, tipicamente para teores menores que 10% de umidade, para minimizar a quantidade de água no produto líquido (bio-óleo); moagem da biomassa para obter tamanho de partículas suficientemente pequeno para acelerar a velocidade da reação; eficiente e rápida separação do carvão dos gases e vapores formados; e condensação rápida dos vapores e coleta do bio-óleo.^{34, 53}

Uma vantagem deste processo é a não geração de resíduos, uma vez que o bio-óleo e o carvão sólido formado podem ser usados como combustível e o gás pode ser reciclado de forma a voltar para o processo.¹⁴

Na literatura encontra-se uma vasta quantidade de trabalhos que visam o uso da pirólise rápida para converter diferentes biomassas em produtos de maior valor agregado e/ou biocombustíveis.^{31, 47-49, 56, 57}

Phan *et al.*⁴⁷ converteram diferentes tipos de biomassas típicas do Vietnã (palha e casca de arroz, caroço de milho e bagaço de cana-de-açúcar) em bio-óleo através da pirólise rápida. O processo foi conduzido em um reator de leito fluidizado mantido à temperatura de 500 °C com tempo de residência menor que 2 s. As biomassas apresentaram teor de umidade menor que 2% e foram moídas até o tamanho de partícula menor que 2 mm. De acordo com os autores, o rendimento dos bio-óleos obtidos com as diferentes biomassas foi superior a 50%.

Pattiya A.⁵⁸ avaliou a produção de bio-óleo a partir da pirólise rápida de resíduos da plantação de mandioca (talo e rizoma). De acordo com os resultados obtidos, a faixa de temperatura entre 475-510 °C apresentou o maior rendimento para a produção de bio-óleo para as duas biomassas avaliadas, sendo o rendimento de bio-óleo superior a 60% para ambas as biomassas.

O processo de pirólise rápida tem sido empregado para a produção de aromatizantes alimentícios (substituindo o processo de pirólise lenta, o qual produz baixos rendimentos), e especialmente, na produção de combustíveis e produtos químicos.⁸

2.2.1.1 Pirólise rápida catalítica

A pirólise rápida catalítica da biomassa é um método que tem sido utilizado para melhorar a qualidade do bio-óleo.^{59,60} De acordo com Pattiya⁵⁹ a adição de um catalisador no processo de pirólise melhora as reações de craqueamento das moléculas pesadas nos produtos gerados, resultando na produção de um bio-óleo mais leve e menos viscoso, além de induzir as reações que envolvem a remoção de espécies oxigenadas reativas, especialmente, compostos com carbonila, levando a produção de um bio-óleo com maior calor específico e melhor estabilidade.

De acordo com o posicionamento do catalisador dentro do reator, a pirólise catalítica pode ser dividida em dois diferentes processos: no local (do inglês “*in-situ*”) e no leito (do inglês “*in-bed*”). No processo “*in situ*”, a biomassa é craqueada para produzir vapor pirolítico que segue para o leito catalítico (presença do catalisador) onde é convertido em bio-óleo e nos demais produtos gasosos e sólidos produzidos pela pirólise. No processo “*in-bed*”, a pirólise catalítica ocorre no reator onde está a biomassa e o catalisador. A mistura da biomassa com o catalisador permite um contato direto entre os dois. O processo “*in-situ*” tem a desvantagem de, geralmente, produzir maiores quantidades de água e coque e, conseqüentemente, menor rendimento de bio-óleo, entretanto este método possibilita maior controle sobre o processo, pois a temperatura de pirólise pode ser controlada de forma independente da temperatura do catalisador.^{61, 62}

Entre os catalisadores usados nos processos catalíticos, as zeólitas são as mais utilizadas nos processos das indústrias petroquímicas, de refino de óleo e de geração de produtos químicos.⁶³ A denominação zeólita tem origem grega, derivada das palavras *zeo* (ferver) e *lithos* (pedra), devido à sua capacidade de liberar vapor d'água sob aquecimento.⁶⁴ As zeólitas são aluminossilicatos cristalinos microporosos, que estruturalmente, são formadas por uma rede tridimensional de tetraedros interligados, contendo canais e cavidades de dimensões moleculares. Os tetraedros são constituídos por unidades de SiO_4 e $[\text{AlO}_4]^-$ que se ligam através do compartilhamento de átomos de oxigênio para formar as unidades secundárias de construção.^{60, 65} A carga negativa do $[\text{AlO}_4]^-$, gerada pela substituição de átomos de silício da rede por átomos de alumínio na estrutura da zeólita, é compensada por íons positivos que mantêm a eletroneutralidade global da zeólita.⁶⁰ Normalmente a compensação das cargas negativas da rede é feita com metais alcalinos e alcalinos terrosos. Entretanto, estes metais podem ser substituídos por prótons, para que se forme um sítio ácido de Brønsted.⁶⁶ Metais de transição também podem ser utilizados para ajustar a acidez das zeólitas.⁶⁷⁻⁷⁰ Existe uma série de estratégias de síntese que podem ser desenvolvidas para a incorporação e/ou adequação das espécies ácidas de Lewis ou de Brønsted, como impregnação, deposição, precipitação, calcinação e redução.⁶⁶ Mesmo após a síntese pode-se agir sobre o zeólito, alterando-se sua composição química e, conseqüentemente, suas propriedades.⁶⁵

A maioria das estruturas zeolíticas pode ser sintetizada dentro de uma faixa extensa de razão silício/alumínio. Quanto menor essa relação, mais alumínio está presente na estrutura e maior à quantidade de cátions de compensação.⁶⁶ Assim, a proporção de alumínio é uma propriedade importante, pois afeta a distribuição da densidade de carga negativa na rede, a capacidade de troca iônica, a densidade e força dos ácidos de Brønsted, assim como a estabilidade térmica, a hidrofobicidade/ hidrofobicidade das superfícies interna e externa e as dimensões da cela unitária.⁷¹

De forma geral, as zeólitas agem como “sólidos ácidos” os quais são capazes de converter as moléculas adsorvidas em sua superfície em várias formas através da transferência do próton do sólido ácido para a molécula adsorvida (sítio ácido de Brønsted) ou transferindo um par de elétrons da molécula adsorvida para a superfície sólida (sítio ácido de Lewis).⁷²

O emprego das zeólitas como catalisadores heterogêneos em processos industriais se deve às suas propriedades físicas e químicas que podem ser controladas durante a sua preparação, visando uma aplicação específica.⁷² Entre estas propriedades destacam-se: a área superficial específica elevada; dimensões moleculares dos poros, canais e cavidades, que lhes conferem diferentes tipos de seletividade de forma; capacidade de adsorção elevada; facilidade na separação de reagentes e produtos; possibilidade de modelar as propriedades eletrônicas dos sítios ativos; possibilidade de pré-ativar as moléculas dentro dos poros, pela existência de campos elétricos elevados e do confinamento molecular.⁷³ Entre as diferentes zeólitas empregadas em processos catalíticos de biomassas,^{59, 67, 74, 75} está a ZSM-5 (do inglês “*Zeolite Socony Mobil-5*”) patenteada pela Mobil na década de 70.⁷⁶ Esta zeólita apresenta estrutura conhecida como MFI (Mobil-five)⁶⁵ e tamanho de poros de 5,5 Å de diâmetro.⁷²

O ZSM-5 apresenta algumas vantagens em relação a outros catalisadores, como capacidade de troca iônica, estrutura porosa tridimensional, acidez, bom desempenho em termos de produção de hidrocarbonetos aromáticos.⁷⁷ A estrutura da ZSM-5 pode ser descrita em termos de unidades pentasil (um anel com forma de favo de mel), conforme **Figura 4a**. Estas unidades são ligadas entre si por pontes de hidrogênio para formar cadeias pentasil.⁷² A **Figura 4b** apresenta a estrutura tridimensional da zeólita ZSM-5.

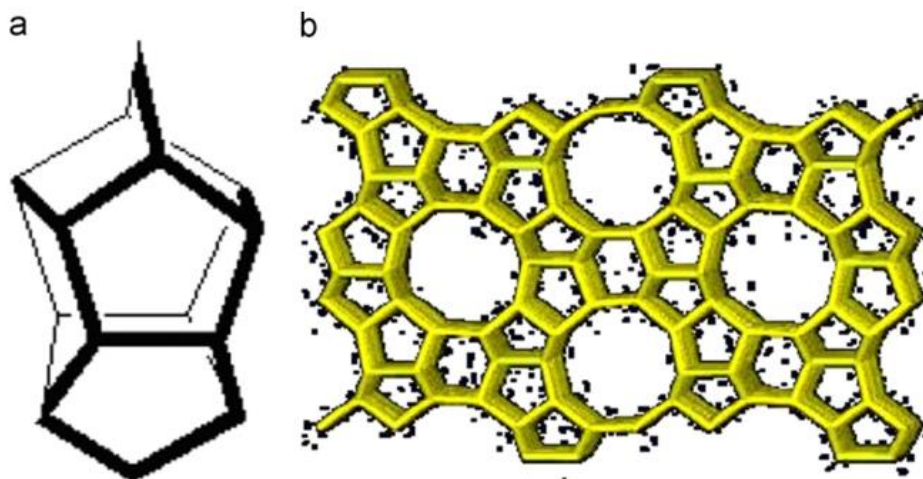


Figura 4: Estrutura da zeólita ZSM-5 (a) e Unidade pentasil (b).⁷⁸

O emprego da pirólise catalítica com ZSM-5 tende a produzir um bio-óleo com melhores propriedades, ou seja, com menor teor de compostos oxigenados.^{59, 67} Esta característica é de grande interesse para a indústria que pretende usar o bio-óleo como biocombustível, visto que estes compostos estão entre os principais responsáveis pela baixa qualidade do bio-óleo, incluindo alta viscosidade, incompatibilidade com os combustíveis convencionais e instabilidade química.⁷⁹ A remoção do oxigênio pode ser pelos processos de desidratação, descarbonilação e descarboxilação levando a formação de H₂O, CO e CO₂, respectivamente.⁵⁹ A remoção de oxigênio na forma de H₂O é favorecida usando baixas temperaturas, enquanto as formas CO e CO₂ são favorecidas com altas temperaturas.⁸⁰ A remoção na forma CO e CO₂ são preferidas, pois o hidrogênio poderia ser utilizado para a formação de hidrocarbonetos e, por consequência, diminuindo a deposição de carbono nos poros das zeólitas e também o teor da quantidade de água no bio-óleo.⁶⁰

Muitos artigos reportam o uso do processo de pirólise catalisada com zeólita ZSM-5 usando diferentes biomassas para a produção de bio-óleo com alto teor de compostos aromáticos.^{59, 81-83}

Pattiya et al.⁵⁹ investigaram o uso de diferentes catalisadores (dois aluminossilicatos mesoporosos – Al-MCM e Al-MSU-F; catalisador comercial baseado em alumina – MI-575 e a zeólita ZSM-5) no processo de pirólise catalítica de rizomas de mandioca. De acordo com os autores, apesar de ambos os catalisadores favorecerem a produção de hidrocarbonetos aromáticos e conseqüentemente, reduzirem a formação de compostos oxigenados derivados da lignina no bio-óleo, a zeólita ZSM-5 apresentou melhor desempenho. A eficácia do catalisador ZSM-5 na produção de maiores quantidades de hidrocarbonetos aromáticos, em comparação aos demais avaliados, pode ser devido a sua maior acidez em conjunto com sua forma e tamanho, que favorecem a síntese desses compostos.

Zheng et al.⁸¹ avaliaram o efeito do tamanho do cristal da zeólita ZSM-5 na pirólise catalítica de seis diferentes materiais (celulose, hemicelulose, lignina, pinha, sabugo e palha de milho). Os autores verificaram que as diferentes espécies de biomassas apresentaram notável diferença na distribuição dos compostos. Em relação ao teor de hidrocarbonetos aromáticos, a ordem de rendimento foi: celulose > hemicelulose > lignina. Para as demais biomassas, o rendimento na produção de hidrocarbonetos aromáticos foi: palha de milho > sabugo de milho > pinha. De acordo com os autores, a palha de milho apresentou maior rendimento de hidrocarbonetos em função desta apresentar o maior conteúdo de holocelulose na sua constituição, entre as três biomassas avaliadas.

Gopakumar et al.⁸² avaliaram o desempenho do catalisador H-ZSM-5 (forma protonada do ZSM-5) na pirólise catalítica da alga *Chlorella vulgaris*. O bio-óleo com esse processo apresentou maior quantidades de hidrocarbonetos aromáticos quando comparado com o processo de pirólise sem catalisador.

Huang *et al.*⁸³ estudaram a pirólise catalítica da serragem de pinho, usando o catalisador ZSM-5. Foram avaliadas diferentes temperaturas do reator de pirólise catalítica de dois estágios. De acordo com os resultados da análise via GC/MS dos bio-óleos, os teores mais elevados de hidrocarbonetos aromáticos (58,6 %) na fase orgânica foram obtidos com a temperatura de 500 °C, tanto para a pirólise quanto para o catalisador. O bio-óleo obtido pela pirólise catalítica apresentou menor viscosidade e maior poder calorífico quando comparado ao bio-óleo obtido pelo processo de pirólise convencional. De acordo com os autores, os resultados obtidos com esse trabalho sugerem que o reator de pirólise catalítica de dois estágios em conjunto com o catalisador ZSM-5 possuem grande potencial para produção de bicomustíveis.

Mihalcik *et al.*⁸⁴ empregaram um pirolisador acoplado a um cromatógrafo gasoso com espectrômetro de massas (Py-GC/MS) para estudar a pirólise catalítica de diferentes biomassas lignocelulósicas (carvalho, planta *Panicum virgatum*, sabugo e palha de milho). De acordo com os autores, entre os catalisadores avaliados, o H-ZSM-5 foi o mais efetivo na produção de hidrocarbonetos aromáticos a partir do vapor da pirólise.

Carlson *et al.*⁸⁵ avaliaram o desempenho da pirólise rápida catalítica com ZSM-5 de serragem de pinho de madeira usando três diferentes reatores (um reator de leito fluidizado borbulhante de escala laboratorial, um reator de leito fixo e um pirolisador analítico (*pyroprobe*) acoplado a um GC/MS). De acordo com os autores, a combinação do rendimento de compostos aromáticos e olefinas foi maior para os reatores de leito fixo e fluidizado. Além disso, as olefinas produzidas durante a pirólise catalítica foram recicladas para o reator novamente o que aumentou o rendimento de aromáticos em 20%.

Estudos também apontam que o catalisador de craqueamento catalítico fluidizado (FCC do inglês "*Fluid Catalytic Cracking*") quando associado à zeólita ZSM-5 demonstram eficiência na geração de bio-óleo com melhores qualidades. Os catalisadores FCC são usadas nas refinarias de petróleo para converter frações pesadas de petróleo em gasolina, diesel e gás. O catalisador de craqueamento FCC é constituído de uma matriz (alumina), de um ligante (sílica) e de uma zeólita Y.⁸⁶ Com este processo a remoção do oxigênio ocorre por reações de desidratação, reações de craqueamento de moléculas maiores de oxigenados formando moléculas menores, reações que produzem hidrogênio, reações que consomem hidrogênio e produção de moléculas maiores por reações que formam ligações C – C como reações de Diels-Alder e condensação aldólica.⁶³

Mante *et al.*⁸⁷ estudaram o efeito da zeólita ZSM-5 como co-catalisadora do catalisador de craqueamento FCC na pirólise de diferentes biomassas. Diferentes proporções do aditivo baseado na ZSM-5 e do catalisador de craqueamento (FCC) foram avaliadas. De acordo como os autores, a mistura dos catalisadores (ZSM-5 e FCC) aumentou o rendimento da fração orgânica líquida e diminuiu o rendimento de coque/carvão

vegetal e de gás. Além disso, ocorreu uma diminuição dos gases gerados CO_2 , CH_4 e H_2 e um aumento na geração de hidrocarbonetos C_5 . A adição do ZSM-5 ao catalisador de craqueamento (FCC) melhorou também a formação de compostos aromáticos e diminuiu os hidrocarbonetos alifáticos. Ainda, de acordo com os autores, o processo de pirólise com os catalisadores FCC/ZSM-5 produziu um bio-óleo com viscosidade relativamente menor quando comparado com processo de pirólise usando somente o catalisador FCC.

Somolada *et al.*⁷⁵ avaliaram vários catalisadores comerciais incluindo zeólita H-ZSM-5 (forma protonada da zeólita ZSM-5), catalisador de craqueamento FCC, metais de transição (Fe/Cr) e aluminas na pirólise catalítica de uma mistura padrão de compostos oxigenados para simular a composição dos vapores de pirólise (bio-óleo), usando em reator de leito fixo. A zeólita H-ZSM-5 foi mais efetiva na redução dos grupos carbonila, resultando numa maior seletividade a produtos aromáticos. Os catalisadores contendo metais de transição foram mais seletivos à produção de fenóis leves. Resultados semelhantes foram obtidos usando a biomassa lignocelulósica de serragem de madeira.

Lappas *et al.*⁸⁸ estudaram a pirólise de biomassa lignocel na presença de um catalisador de craqueamento (FCC) e um aditivo comercial à base de ZSM-5, ambos usados no refino de petróleo, em um reator de leito fluidizado circulante (do inglês "*Circulating Fluid Bed*"). De acordo com os autores, a pirólise catalítica com o ZSM-5 resultou em menor rendimento de líquido e em maior produção de água, coque e gás, principalmente CO e CO_2 quando comparada com a pirólise rápida convencional. Entretanto, o líquido (bio-óleo) obtido apresentou melhor qualidade.

A grande quantidade de trabalhos envolvendo a conversão de biomassa em produtos através da pirólise catalítica pode ser devida às vantagens deste processo apontadas por Carlson *et al.*⁸⁵ e citadas a seguir:

- Todos os produtos químicos desejados ocorrem em um único reator;
- Os principais catalisadores utilizados (alumina-sílica) possuem um custo relativamente baixo;
- Não é necessário o emprego de água no processo;
- O processo de pirólise catalítica pode ser usado por uma variedade ampla de biomassa lignocelulósica;
- O pré-tratamento da matéria-prima (biomassa) é simples (secagem e moagem);
- O processo pode ser realizado em reatores de leito fluidizado, os quais, já são utilizados atualmente pelas refinarias de petróleo;
- Os principais produtos produzidos pela pirólise catalítica (aromáticos e olefinas) podem ser incorporados na estrutura já existente;

- As principais matérias-primas usadas pelas indústrias petroquímicas (incluem benzeno, tolueno, xileno, etileno, propileno) podem ser obtidas pela pirólise rápida catalítica.

De acordo com a literatura, a zeólita ZSM-5 é a mais empregada quando se tem por objetivo a produção de bio-óleos para fins de combustível, visto que aumenta o teor de hidrocarbonetos aromáticos e diminui o teor de compostos oxigenados.

2.3 Bio-óleo

O bio-óleo é um líquido de coloração marrom escura com odor característico e com composição elementar próxima da biomassa de origem.³⁷ Ele é composto por uma mistura complexa de hidrocarbonetos, compostos oxigenados e com apreciável percentual de água (entre 15 a 30%), que varia de acordo com a umidade natural da biomassa, com as condições de processo e com o tipo de pirolisador utilizado.^{37, 53} O bio-óleo é miscível em solventes polares como metanol e acetona, mas totalmente imiscível em solventes derivados do petróleo, o que se deve ao alto teor de compostos oxigenados presentes, em torno de 35-40%.⁵³

Quimicamente, o bio-óleo é uma mistura complexa de compostos oxigenados,⁵³ incluindo ácidos carboxílicos, ésteres, álcoois, cetonas, aldeídos, açúcares, furanos, fenóis, guaiacóis e siringóis.^{1, 89} O percentual de cada classe varia de acordo com a biomassa em estudo. Esses compostos são derivados, principalmente, das reações de despolimerização e fragmentação dos três principais constituintes da lignocelulose (celulose, hemicelulose e lignina). Os guaiacóis e siringóis são formados das frações de lignina, enquanto os diversos compostos oxigenados, açúcares e furanos são formados a partir das frações de celulose e hemicelulose.¹ Os éteres, ácidos, álcoois, cetonas e aldeídos são provavelmente formados a partir da decomposição dos variados compostos oxigenados, açúcares e furanos.¹

Além da composição química, o bio-óleo possui algumas outras características que o diferem dos combustíveis derivados do petróleo, como a maior densidade ($1,2 \text{ kg L}^{-1}$), o menor poder calorífico (17 MJ kg^{-1}), é mais instável, podendo sofrer reações de polimerização e condensação ao longo do tempo.⁵³ A instabilidade na composição do bio-óleo ocorre, principalmente, devida à presença de compostos orgânicos altamente reativos (cetonas, aldeídos e ácidos orgânicos), que podem sofrer reações e formar éteres, acetais ou hemiacetais. Estas reações podem aumentar efetivamente a massa molecular do óleo, o teor de água e a viscosidade, resultando em um bio-óleo de baixa qualidade e que, quando armazenado, resulta em separação de fases.¹

Quando se objetiva o uso do bio-óleo como combustível, deve-se modificá-lo quimicamente através de processos, como hidrodessoxigenação,^{90, 91} melhoramento (do inglês “*upgrading*”) com zeólitas,^{82, 83} mistura com o diesel formando uma emulsão⁹² e a reforma com vapor para produzir hidrogênio ou gás de síntese.⁹³

2.3.1 Aplicações do bio-óleo e da sua respectiva fase aquosa

A grande diversidade de funções químicas presentes na composição do bio-óleo torna-o uma ótima fonte para a obtenção de produtos químicos. Essa possibilidade é muito atrativa, pois muitos produtos que podem ser extraídos ou derivados do bio-óleo possuem maior valor agregado quando comparado com combustíveis ou produtos energéticos.³⁷

O bio-óleo obtido pelo processo de pirólise pode ser utilizado para a geração de eletricidade, calor, fonte de matéria-prima para obtenção de produtos químicos e após um processo de melhoramento pode também ser utilizado como combustíveis, conforme **Figura 5**. Entre os produtos que podem ser obtidos a partir do bio-óleo estão o ácido acético, hidrogênio, hidroxiacetaldeído, levoglucosano e outros compostos que são matéria-prima para a produção de aromatizantes alimentícios, resinas, agroquímicos, adesivos, preservativos e fertilizantes.⁸⁸

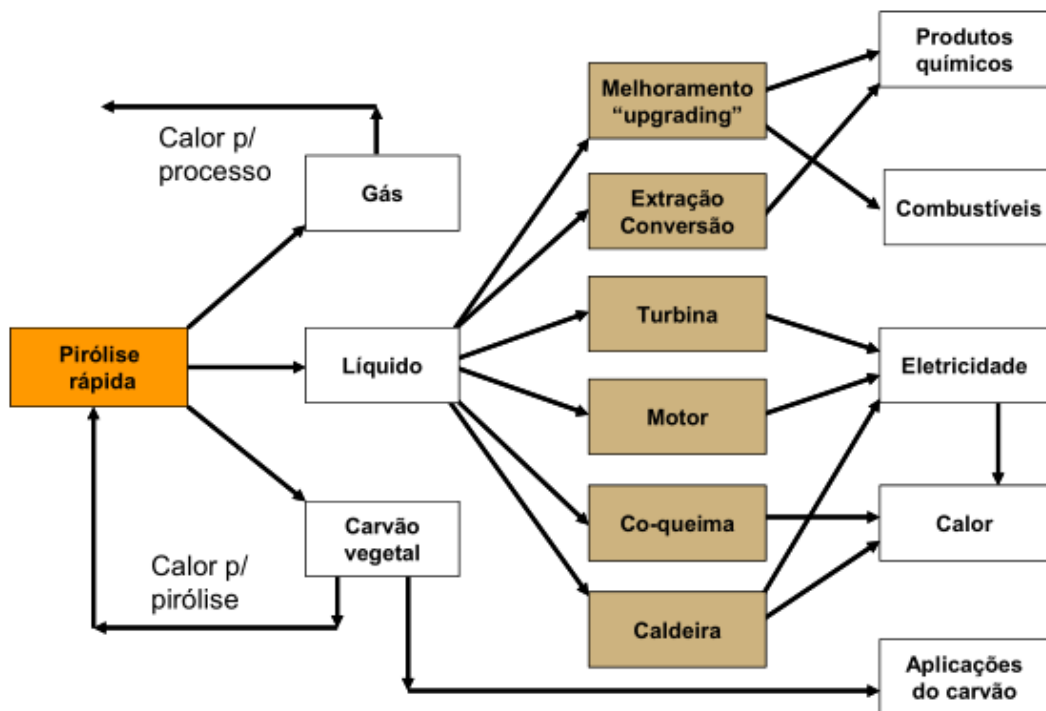


Figura 5: Aplicações do bio-óleo a partir da pirólise rápida (Adaptado de Bridgwater, 2006).³⁴

Vários estudos têm avaliado as potencialidades do bio-óleo em aplicações que agregam mais valor ao produto formado, uma vez que, a proposta energética atual visa à

geração de bio-óleos a partir de resíduos, tanto agrícolas, quanto industriais e rejeitos domésticos. Choi *et al.*⁹⁴ obtiveram bio-óleo a partir da pirólise do resíduo gerado na produção do óleo de palma e o empregaram na síntese de resinas fenólicas para produção de compensados. A resina foi obtida misturando-se, a temperatura ambiente, o bio-óleo obtido com uma resina comercial, composta basicamente por fenol e benzaldeído. Os autores avaliaram três diferentes formulações de resinas fenólicas, nas quais o teor em peso de bio-óleo presente foi de 0,25% e 50%. A eficiência foi avaliada com uma resina fenólica comercial. O percentual de 25% (p/p) do bio-óleo apresentou resultados de eficiência equivalente ao obtido com a resina comercial. Um melhor resultado foi obtido ao adicionar um catalisador à resina. Os autores concluíram que foi possível substituir até 25%, em peso, do fenol de origem fóssil. Outros trabalhos na literatura também avaliaram o uso de bio-óleo rico em compostos fenólicos para a produção de resinas fenólicas e bons resultados foram obtidos.^{95, 96}

A produção de bio-óleo para a obtenção de produtos químicos em geral tem sido avaliada em diversos trabalhos:⁹⁷⁻¹⁰⁰

Quan Bu *et al.*⁹⁷ propuseram um processo de melhoramento do bio-óleo de serragem para aumentar o percentual de compostos fenólicos. Para isso, os autores realizaram uma pirólise de serragem em micro-ondas usando diferentes quantidades de catalisador. O bio-óleo obtido apresentou um teor de 74,6% de fenóis. A obtenção de fenóis a partir do bio-óleo foi avaliada também por Salema e Ani⁹⁸, Bu *et al.*⁹⁹ e Liang *et al.*¹⁰⁰, com percentuais variando de 67 a 93%.

Zhu e Lu¹⁰¹ elaboraram um compêndio abordando métodos para a produção de diversos produtos químicos importantes para a indústria obtidos a partir da pirólise da biomassa, entre eles pode-se citar:

- **Levoglucosano:** que é formado a partir de reações de despolimerização da celulose, entre outras aplicações, pode ser utilizado na produção de polissacarídeos com atividades biológicas. Apesar de não apresentar um alto rendimento no bio-óleo, (cerca de 5,3% - bio-óleo de madeira) quando se objetiva a sua obtenção, pode-se empregar pequenas quantidades de ácidos ou sais ácidos que ajudam na desmineralização da biomassa. Com o tratamento da madeira com ácido fosfórico o rendimento de levoglucosano foi em torno de 34%.¹⁰²
- **Furfural:** formado a partir da quebra da celulose e da hemicelulose, é muito utilizado como solvente orgânico ou reagente orgânico para a produção de medicamentos, resinas, aditivos alimentares, aditivos de combustíveis entre outras aplicações. Maiores rendimentos do furfural no bio-óleo podem também ser obtidos com o uso de catalisadores. De acordo com Wan¹⁰³, o emprego de cloreto de magnésio (MgCl₂)

como catalisador resultou em alta seletividade na produção de furfural, cerca de 80 % do bio-óleo obtido, de acordo com as análises por GC/MS.

- **Ácido acético:** pode ser obtido por diferentes formas durante a pirólise rápida da biomassa. Em grande quantidade pela desacetilação de hemicelulose e em pequena quantidade pela cisão do anel pirolítico da holocelulose e pela quebra da cadeia lateral da lignina. O conteúdo de ácido acético pode ser superior a 10% no bio-óleo produzido a partir de biomassas ricas em grupos acetil.¹⁰⁴ A desacetilação da hemicelulose ocorre em temperaturas relativamente baixas (em torno de 300 °C), menores que as necessárias para a decomposição dos principais componentes da biomassa durante a pirólise. Desta forma, se a biomassa for submetida à pirólise rápida a temperaturas em torno de 300 °C por um pequeno tempo de residência, parte dos grupos acetil se quebram para formar o ácido acético, enquanto os outros componentes não são fortemente influenciados. Quando se objetiva a produção de ácido acético a partir da biomassa, processo de pirólise pode ser realizado em duas etapas: uma primeira, empregando temperaturas mais baixas (em torno de 300 °C) que irá favorecer a sua obtenção e, uma segunda etapa, com temperaturas mais elevadas para produzir o bio-óleo. O ácido acético também pode ser produzido durante a produção de furfural através da pirólise rápida de biomassa impregnada com ZnCl₂ ou MgCl₂ como catalisador. Nessa condição, o ácido acético pode ser o segundo mais importante produto orgânico obtido.

Diversos estudos são descritos na literatura visando transformar o bio-óleo obtido por diferentes fontes de biomassa em combustível. O processo denominado *upgrading* (melhoramento) tem sido aplicado com esta finalidade, apesar de muitas vezes, este ser trabalhoso e apresentar um custo elevado. Outra linha de pesquisa envolve a obtenção de produtos químicos a partir da biomassa, área chamada de “química fina”, que visa à obtenção de compostos para serem utilizados como matéria-prima para a indústria. Ambas as finalidades ainda encontram-se em amplo desenvolvimento e não existe, um padrão estabelecido para a produção tanto de combustível quanto de compostos químicos.

Dentre os processos de *upgrading* para a produção de combustíveis a partir do bio-óleo, Fisk *et al.*¹⁰⁵ propuseram um método que diminuiu o teor dos compostos oxigenados de 41,4 % para 2,8% empregando diferentes condições de pirólise e catalisadores. A análise por GC/MS do bio-óleo mostrou que a composição deste tornou-se altamente aromática. Sendo composto majoritariamente por benzenos alquil substituídos e ciclohexanos. Trabalhos semelhantes encontram-se na literatura¹⁰⁷⁻¹¹⁰ assim como, revisões sobre este assunto.^{1, 72, 111-114.} A grande quantidade de trabalhos abordando este assunto evidencia a importância deste estudo, pois visa melhorar as propriedades do bio-óleo e ampliar suas

aplicações. A **Tabela II** apresenta alguns trabalhos que realizaram um processo de melhoramento do bio-óleo obtido por pirólise rápida empregando diferentes biomassas.

Tabela II: Trabalhos que avaliaram o melhoramento do bio-óleo.

Biomassa	Condições pirólise	Método/ Catalisador	Resultados obtidos	Fonte
Alga (Chlorella)	Reator de leito fixo (300 °C e pressão 2x10 ⁻⁶ Pa)	Hidrogenação /Ni-Co-Pd/ γ - Al ₂ O ₃	O rendimento do bio-óleo refinado foi em torno de 90%. O valor do poder calorífico e o número de cetano aumentaram, em torno de 18 e 71%, respectivamente. A viscosidade diminuiu em torno de 66% (dados em relação ao bio-óleo sem o processo de melhoramento).	¹⁰⁸
Fibras de madeira	Reator de leito fluidizado (Temp. entre 400- 500 °C; tempo de residência entre 2-4s).	Na ₂ CO ₃ / γ -Al ₂ O ₃	Obtenção de um bio-óleo com boas características para o uso como combustível (diminuição do teor dos compostos oxigenados de 47,5% (p/p) para 16,4% (p/p), percentual de água de 5,8% (p/p), poder calorífico de 36,1 MJ/Kg, remoção total dos ácidos carboxílicos e pH neutro).	¹¹⁵
Serragem	Reator de leito fluidizado (500 °C)	H-ZSM-5	O bio-óleo obtido por pirólise catalítica apresentou um menor teor de ácidos. A área foi de 14,5% (bio-óleo não catalisado) para 3,0%, e um menor teor de cetonas (7,9% para 4,1%).	¹¹⁶
Serragem de pinho	Reator de leito fixo (500 °C)	Catalisador comercial de equilíbrio (E- Cat)	O bio-óleo apresentou alto rendimento de hidrocarbonetos (53,5% (p/p)) e conseqüentemente redução de compostos oxigenados.	¹¹⁷

Continua.

Resíduo de mamona (Jatropha)	Pirolisador analítico acoplado a um GC/MS	H-ZSM-5, Co-ZSM-5, Ni-ZSM-5	Os bio-óleos obtidos com ambos os catalisadores apresentaram um maior percentual de hidrocarbonetos aromáticos e menor teor de compostos oxigenados. O bio-óleo obtido com Ni-ZSM-5 foi o que apresentou maior rendimento de hidrocarbonetos (97,6%)	118
------------------------------	---	-----------------------------	--	-----

O bio-óleo gerado no processo de pirólise da biomassa apresenta uma fração aquosa, a qual, de acordo com estudos já realizados, pode também ser outra fonte importante de matéria-prima para a obtenção de produtos para a indústria química. O percentual de água no bio-óleo varia entre 15 a 30% e prejudica algumas propriedades do bio-óleo, principalmente se este for produzido para o uso como biocombustível.⁵³ Desta forma, a remoção da água do bio-óleo pode ser considerada um pré-tratamento, pois melhora as propriedades do bio-óleo e reduz o risco de envenenamento dos sítios ativos do catalisador, especialmente no caso de metais nobres. Entre os métodos utilizados para esta proposta estão a desidratação e a separação físico-química^{72,119}

A adição de água para a separação das fases é um método que pode ser utilizado.¹¹⁹ Quando se adiciona um excesso de água no bio-óleo, ocorre à formação de duas fases. A camada superior corresponde à fase aquosa e contém principalmente compostos de alta polaridade como levoglucosano, açúcares, derivados do furano, ácidos orgânicos e compostos fenólicos de baixo peso molecular.^{110,119} A camada inferior corresponde à fase orgânica, a qual apresenta compostos menos polares, como siringóis, guaiacóis, compostos fenólicos de alto peso molecular, entre outros.¹¹⁹

Abou-Yousef e Hassan¹¹⁹ utilizaram a fase aquosa do bio-óleo gerado a partir da pirólise de pinho de madeira verde, para a obtenção do furfural e do hidroximetil furfural, compostos que podem ser convertidos em vários produtos químicos, como aditivos alimentares. Para a obtenção desses compostos, os autores primeiramente adicionaram água ao bio-óleo para favorecer a separação das fases. Após, foi realizada a extração do hidroximetil furfural da fase aquosa e, com o intuito de aumentar o rendimento dos compostos de interesse, os autores converteram os açúcares presentes na fase aquosa em furfural e hidroximetil furfural através do uso de catalisadores.

Xu *et al.*¹²⁰ propuseram um tratamento para a remoção de hidrocarbonetos presentes na fase aquosa do bio-óleo produzido pela pirólise rápida de resíduos da cana-de-açúcar. Para isto, os autores utilizaram carvão ativado para a adsorção dos hidrocarbonetos presentes na fase aquosa. A medida foi feita através da análise do carbono orgânico total.

Os resultados indicaram uma remoção em torno de 41% dos hidrocarbonetos presentes. De acordo com os autores, esse processo ajuda a purificar a água para ser descartada e também recuperar hidrocarbonetos para serem utilizados para a produção de energia. Os autores também ressaltaram que o carvão ativado usado no processo pode ser obtido a partir do bio-carvão obtido no próprio processo de pirólise.

Vitasari *et al.*¹²¹ propuseram uma metodologia para a extração da água do bio-óleo de pirólise com o objetivo de separar as fases pela adição de uma quantidade de água diretamente ao bio-óleo e de avaliar a taxa de agitação na composição do equilíbrio de separação entre as fases. De acordo com os resultados obtidos, o teor de água adicionado deve ser de 30 a 45% em peso do bio-óleo, a fim de que ocorra a separação de fases. Da mesma forma que Xu *et al.*¹²⁰, os autores¹²¹ também caracterizaram a fase aquosa como sendo rica em compostos orgânicos polares, enquanto a fase orgânica, rica em compostos de menor polaridade. Mesmo não sendo um processo seletivo, uma vez que extrai uma ampla gama de compostos, pode ser útil para recuperação de cerca de 80 – 90% de compostos polares na fase aquosa e reduzir a complexidade do bio-óleo (fase orgânica).

O aproveitamento da fase aquosa do bio-óleo é muito importante sob o ponto de vista econômico quanto ambiental, pois compostos orgânicos presentes nesta fase podem ser recuperados e a água, após remoção destes, pode ser reutilizada no processo. Assim, o processo torna-se mais sustentável.¹²² Neste sentido, Zhu *et al.*¹²³ avaliaram o reaproveitamento da água residual, gerada como co-produto da liquefação hidrotérmica de casca de cevada, no processo de produção do bio-óleo. Liquefação térmica é um processo de transformação da biomassa em produtos líquidos através de altas pressões (50-200 atm.) e temperaturas moderadas (250 – 450 °C). Neste processo a carga é uma suspensão de biomassa em um solvente, normalmente água, sob atmosfera de hidrogênio e/ou monóxido de carbono na presença ou não de catalisadores.¹ De acordo com os resultados obtidos por Zhu *et al.*¹²³ não foi verificada diferença significativa na distribuição dos compostos e no poder calorífico do bio-óleo obtido com a água reutilizada em relação ao bio-óleo obtido com o uso de água fresca.

De modo geral, o bio-óleo possui uma diversidade de aplicações, o que representa um grande potencial para as biorrefinarias, pois estas podem combinar a geração de bio-óleo para a produção de combustíveis como também para a produção de produtos químicos.³⁷

2.4 Fracionamento

A composição química do bio-óleo apresenta uma elevada complexidade em virtude da grande quantidade e variedade de compostos presentes, sendo que estes podem variar em mais de uma ordem de magnitude.¹ As técnicas de fracionamento podem ser uma

alternativa para diminuir essa complexidade, uma vez que produzem frações com composição química diferente e mais simples. A separação de diferentes frações, com compostos que apresentam características de acordo com a polaridade do solvente empregado no processo, pode, por exemplo, permitir a separação dos hidrocarbonetos, dos compostos oxigenados como fenóis e cetonas. Por sua vez, a fração contendo os hidrocarbonetos pode ser utilizada como biocombustível e a fração contendo os compostos oxigenados, utilizada como matéria-prima para a indústria. Uma boa técnica de fracionamento deve separar os grupos químicos semelhantes, independente da amostra de bio-óleo analisada, possibilitando uma comparação efetiva entre as amostras de diferentes origens e pirólises.¹²⁴

Cromatografia em coluna é uma técnica muito empregada na química analítica para isolar compostos presentes em uma matriz.¹²⁵ O fracionamento por cromatografia líquida preparativa favorece a separação dos compostos presentes na amostra de acordo com a polaridade e solubilidade destes com os solventes utilizados e é um dos métodos mais empregado na literatura para a separação de compostos em diferentes tipos de biomassa, conforme descrito em alguns trabalhos que seguem:¹²⁴⁻¹³²

Garcia-Pérez *et al.*¹²⁴ realizaram a caracterização da composição química de duas amostras de bio-óleos de madeira de origens diferentes (madeira de coníferas e madeira de lei). O fracionamento foi feito em coluna de vidro empacotada com sílica gel, e os compostos foram eluídos com solventes de diferentes polaridades (pentano, benzeno, diclorometano, acetato de etila e metanol). Os compostos majoritários foram os mesmos nos dois bio-óleos e correspondem a compostos derivados de açúcares, fenóis, aldeídos, ácidos e hidrocarbonetos. De acordo com os autores, o agrupamento dos compostos presentes no bio-óleo, de acordo com as suas classes químicas, ajudou na caracterização das amostras.

Ma e Agblevor¹²⁵ realizaram um fracionamento de amostras de bio-óleos provenientes da pirólise de resíduos agroindustrial, mais especificamente, “cama de aviário”. Os solventes empregados foram hexano, tolueno, clorofórmio e metanol, utilizados em ordem crescente de polaridade. As frações com hexano e tolueno apresentaram baixa viscosidade, enquanto as frações com tolueno e metanol apresentaram alta viscosidade (estado sólido nas condições ambientes do laboratório). As frações com maiores rendimentos foram a fração com clorofórmio, seguido da fração com hexano. As quatro frações foram caracterizadas usando a espectroscopia no infravermelho com transformada de Fourier (do inglês “*Fourier Transform Infrared Spectrometry*” - FT-IR) e por espectrometria de ressonância magnética nuclear (do inglês, “*Nuclear Magnetic Resonance*” ¹³C - RMN). Os compostos majoritários presentes nas quatro frações foram isolados empregando cromatografia em coluna. Como resultado, foram obtidas quatro classes de compostos (ácidos graxos, esteróis, fenóis e carboidratos) e foram isolados onze compostos

majoritários presentes nas quatro frações. O composto majoritário da fração com hexano foi ácido oleico (48,6%), e na fração com metanol foi a 1,6-anidro- β -D-glucose (16,7%). De acordo com os autores, o método de fracionamento apresentou excelentes resultados, uma vez que além de diminuir a complexidade da amostra, foi possível isolar, entre outros, o ácido oleico, que pode ser utilizado em aplicações como biolubrificante.

Wang *et al.*¹²⁶ propuseram um fracionamento em coluna aberta para separar compostos com características semelhantes de uma amostra de alcatrão vegetal, obtido pela pirólise lenta da madeira. A coluna foi empacotada com sílica gel e avaliou-se o desempenho de duas séries de solventes para fazer a eluição dos compostos da coluna. No primeiro fracionamento os compostos foram eluídos, em sequência, por ciclohexano, benzeno e metanol, gerando três frações com diferentes composições. No segundo fracionamento os analitos foram eluídos com ciclohexano, diclorometano e metanol. De acordo com os resultados obtidos através de análise por cromatografia gasosa, no primeiro fracionamento, a fração obtida com ciclohexano foi rica em alcóxi monofenóis, enquanto a fração gerada com benzeno apresentou alquil monofenóis e outros cinco compostos oxigenados aromáticos. A fração com metanol apresentou composição diversa e com a presença de difenóis. O segundo fracionamento apresentou a mesma distribuição dos compostos, onde a fração com diclorometano apresentou composição similar à fração com benzeno. Foi avaliada a substituição do benzeno pelo diclorometano, em virtude do último apresentar menor temperatura de ebulição.

Cunha *et al.*¹²⁹ propuseram um fracionamento pressurizado em coluna (do inglês "*Pressurized Liquid Fractionation*") empacotada com sílica gel usando solventes com crescentes polaridades para separar os compostos do bio-óleo gerado pela pirólise rápida de palha de cana-de-açúcar. As frações obtidas foram analisadas com o uso das técnicas GC/qMS e GC \times GC/qMS (cromatografia gasosa bidimensional abrangente acoplada a um analisador de massas quadrupolar). A fração eluída com solventes mais apolares apresentou grande quantidade de hidrocarbonetos saturados e insaturados. Na fração intermediária os compostos majoritários foram hidrocarbonetos alifáticos e álcoois, enquanto que na fração mais polar, os principais compostos identificados foram açúcares, fenóis e cetonas. De acordo com os autores, o fracionamento promoveu uma melhor seletividade na identificação dos compostos, pois estes foram separados de acordo com as suas respectivas polaridades, em frações, permitindo a identificação de um maior número de compostos.

Acikgoz e Kockar¹³⁰ avaliaram o fracionamento de um bio-óleo obtido por pirólise lenta de linhaça para elucidar a composição química do mesmo. O bio-óleo foi separado em duas frações, ou seja, solúvel e insolúvel em *n*-pentano. A fração solúvel foi submetida à separação em coluna aberta, usando solventes com polaridades crescentes (*n*-pentano,

tolueno e metanol) para obter frações contendo compostos alifáticos, aromáticos e polares, respectivamente. As frações foram analisadas por GC/MS e por H-RMN. De acordo com os resultados obtidos, os compostos solúveis em n-pentano corresponderam a 88% (p/p). O resultado confirmou a separação esperada dos compostos alifáticos (30%), dos aromáticos (34%) e dos compostos polares (36%) após o processo de fracionamento.

Lu *et al.*¹³¹ fracionaram um bio-óleo obtido pela pirólise rápida de casca de arroz utilizando três métodos diferentes. O primeiro fracionamento separou os compostos de acordo com suas solubilidades em três frações diferentes empregando os solventes metanol (amostra 1) acetado de etila (amostra 2) e acetona (amostra 3). O segundo fracionamento foi realizado para separar os compostos de acordo com as suas características ácidas, básicas e neutras. Para isso os compostos foram separados por extração em fase sólida com balanço hidrofílico lipofílico (do inglês "*Hydrophilee Lipophile Balance*" - HLB), sendo os analitos eluídos com acetato de etila (amostra 4), solução com amônia, metanol e água, onde os compostos orgânicos foram extraídos com acetato de etila (amostra 5) e acetato de etila novamente (amostra 6). No terceiro fracionamento do bio-óleo, os compostos foram separados por extração em fase sólida com C18 (octadecil), sendo os analitos eluídos com metanol (amostra 7) acetato de etila (amostra 8) e ciclohexano (amostra 9). Todas as frações obtidas foram analisadas por GC/qMS. De acordo com os resultados, a amostra 1 e 2 apresentaram poucas cetonas e fenóis, enquanto a amostra 3 poucos ácidos e álcoois. Na amostra 4 estavam presentes álcoois, cetonas e aldeídos, enquanto que na amostra 5 cetonas e fenóis e na amostra 6 fenóis e alcanos. As amostras 7 e 8 continham cetonas e fenóis, enquanto a amostra 9 apresentou somente alcanos.

Ba *et al.*¹³² realizaram um fracionamento em coluna, empacotada com sílica gel, do bio-óleo de casca de madeira. Os compostos foram eluídos de acordo com as suas solubilidades nos solventes utilizados (pentano, benzeno, diclorometano, acetato de etila e metanol). A fração com pentano apresentou principalmente alcanos e alcenos. Na fração com benzeno estavam presentes, principalmente, hidrocarbonetos poliaromáticos, enquanto nas frações com diclorometano e acetato de etila foram identificados muitos compostos derivados do fenol e alguns compostos oxigenados. Na fração com metanol estavam presentes compostos mais polares como açúcares.

De forma geral, a principal vantagem dos métodos de fracionamento para caracterização de bio-óleos é a possibilidade de aplicação prática em escala industrial¹²⁵ a qual se encontra ainda em fase de desenvolvimento.

2.5 Cromatografia Gasosa Bidimensional Abrangente (GC×GC)

A cromatografia gasosa bidimensional abrangente - (do inglês “*Comprehensive Two-Dimensional Gas Chromatography*” - GC×GC) é uma poderosa técnica analítica para a análise da composição de amostras com elevada complexidade,¹³³ por apresentar excelente poder de separação, devido à grande capacidade de picos, ou seja, número máximo de compostos que podem ser separados numa mesma análise. Na GC×GC, a capacidade de pico teórica é, aproximadamente, o produto da capacidade de picos das colunas das duas dimensões, visto que toda a amostra é submetida ao processo de separação em ambas as colunas.¹³⁴

A técnica é caracterizada pela utilização sequencial de duas colunas cromatográficas, uma com dimensões similares as colunas capilares convencionais e outra com tamanho e diâmetro menores, de forma que todo o efluente da primeira coluna ou parte representativa do mesmo seja reinjetado na segunda coluna, através da utilização de um modulador.¹³⁵

O modulador faz a conexão (interface) entre as duas colunas cromatográficas e representa o componente fundamental da técnica. Este possui a função de coletar continuamente pequenas frações do eluato da coluna da primeira dimensão (¹D), reconcentrá-las em bandas estreitas, focaliza-las e em seguida, injetá-las rapidamente na coluna da segunda dimensão (²D).¹³⁶ O modulador, ao focalizar o efluente proveniente da primeira coluna e introduzir o mesmo na segunda coluna, deve fazê-lo em uma sequência correta de amostragem para que a resolução cromatográfica obtida na primeira separação seja mantida. Na **Figura 6** pode-se visualizar um esquema representativo do sistema cromatográfico da GC×GC.

Atualmente, existem diversos tipos e configurações de moduladores que podem ser utilizados em GC×GC.^{133, 134} Entre estes, o mais eficiente é o modulador térmico de dois estágios com quatro jatos (do inglês “*Quad-jet Dual Stage Thermal Modulator*”). Esse é um modulador criogênico que opera com dois jatos quentes e dois frios, usando o nitrogênio líquido como fluido criogênico, conforme mostrado na **Figura 6 (b)**.¹³⁹ O primeiro e o segundo estágios são observados quando ocorre a concentração e reconcentração da banda cromatográfica, respectivamente, proveniente da primeira coluna. Um único período de modulação, que corresponde à duração de um ciclo completo de modulação e ao tempo de separação na coluna da segunda dimensão, é composto por quatro etapas. De acordo com a **Figura 6**: no 1º estágio na etapa (1) ocorre o aprisionamento da banda cromatográfica proveniente da coluna da primeira dimensão, pela ação de um jato frio; em (2) ocorre à liberação do efluente para o 2º estágio, através de um jato quente; em (3) ocorre novamente o aprisionamento da banda, repetindo-se os estágios 1º e 2º; em (4) no 2º

estágio ocorre à liberação do efluente amostrado, pela ação do jato quente, para a coluna da segunda dimensão. Cada modulação produz um fatiamento do pico, desta forma, o número de fatias amostradas é determinado pelo período de modulação empregado e pela largura do pico proveniente da primeira dimensão.¹³⁸

a

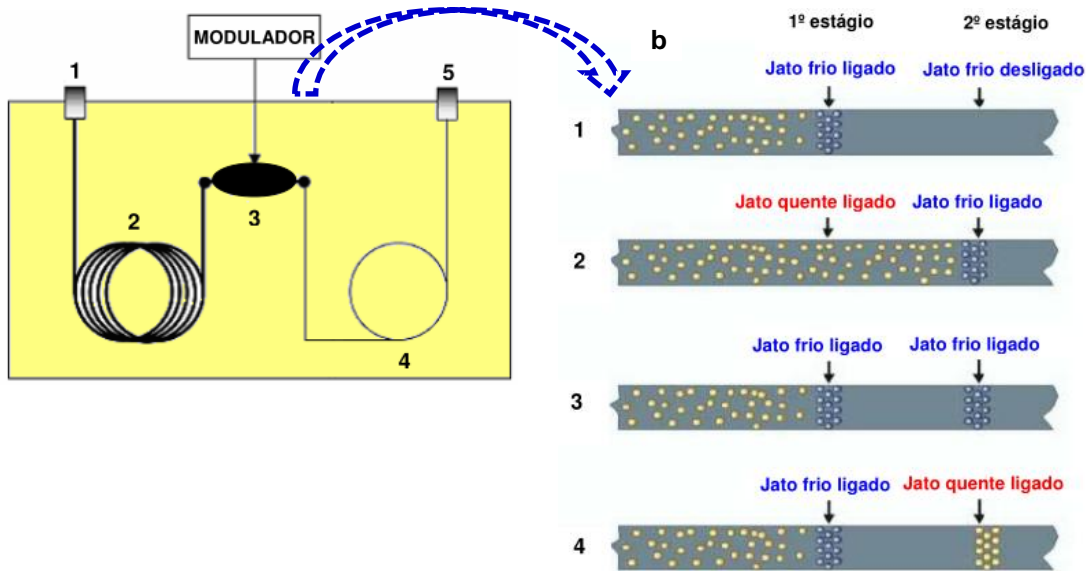


Figura 6: Esquema do sistema GCxGC com detalhe do modulador com duplo jato. Em a) (1) injetor, (2) primeira coluna, (3) modulador, (4) segunda coluna e (5) detector. Em b) Representação do processo de modulação. (Adaptado de Górecki¹³⁷ e Hoh¹³⁸).

Um conjunto de colunas típico para GCxGC é formado por uma coluna longa apolar na primeira dimensão (comprimento 30 m, espessura de filme entre 0,25 – 1 μm) e por uma coluna curta (comprimento 0,5 – 1,5 m e espessura de filme em torno 0,1 μm) de maior polaridade (seletiva) na segunda dimensão. Esta última deve ser curta o suficiente para que o efluente coletado e posteriormente re-injetado, seja completamente eluído antes que a próxima fração seja introduzida. As principais fases estacionárias apolares ou pouco polares usadas são polidimetilsiloxano ou 5% fenil-polidimetilsiloxano e as principais polares são polietilenoglicol ou 50% fenil-polidimetilsiloxano.¹⁴⁰ Quando as colunas apresentam mecanismos de separação diferentes e independentes, a separação é denominada de ortogonal. Neste caso, na coluna de baixa polaridade a separação será de acordo com a pressão de vapor e com os pontos de ebulição dos analitos, enquanto na coluna seletiva (mais polar) a separação será de acordo com as interações dos analitos com a fase.^{137, 141, 142} A configuração ortogonal apresenta um aumento significativo na seletividade.¹³⁵

Os detectores para GCxGC são os mesmos utilizados na cromatografia gasosa monodimensional. Entretanto a resposta deles precisa ser mais rápida.¹³⁷ O espectrômetro de massa por tempo de voo – TOFMS (do inglês “*Time-of-Flight Mass Spectrometry*”) é

caracterizado principalmente pela sua capacidade em produzir um espectro completo para todo pulso de íons que chega a partir da fonte de íons em um tempo extremamente curto. O TOFMS possui uma taxa de aquisição de dados muito rápida (até 500 espectros por segundo), suficiente para a reconstrução do pico. Entretanto, uma taxa de aquisição de 100 Hz garante boa sensibilidade.¹³⁴ Este detector é considerado o mais eficiente entre os detectores que empregam espectrometria de massas para GC×GC. Durante o período entre 1999-2010, mais de 200 artigos foram publicados na área de GC×GC, onde 80% destes usam o TOFMS e em torno de 16% usaram o qMS (analisador de massa quadrupolar).¹⁴³

Na representação gráfica da GC×GC, o registro do sinal do detector em função do tempo, é uma sequência contínua dos cromatogramas curtos para cada fração eluída na segunda dimensão. Dando seguimento a estes registros digitalizados, associado ao período de modulação (intervalo de tempo para cada ciclo de modulação), são construídos os gráficos tridimensionais do sinal do detector versus tempo de retenção na primeira dimensão (1t_R) versus tempo de retenção na segunda dimensão (2t_R).¹³⁹

Entre as vantagens da técnica incluem a grande capacidade de pico, boa seletividade, cromatogramas estruturados para amostras que apresentam séries homólogas de compostos, o que facilita a identificação de compostos desconhecidos.¹⁴⁴⁻¹⁴⁶

Várias revisões sobre a GC×GC têm sido publicadas na literatura, dando enfoque às vantagens desta técnica em relação à sensibilidade, capacidade de separação, resolução, seletividade, combinação de colunas e também as áreas de aplicações desta técnica.^{133, 134, 137, 140, 142, 147-149.}

As vantagens da utilização da técnica para análise de amostras complexas, como bio-óleo, foram evidenciadas em vários trabalhos publicados na literatura, alguns dos quais estão descritos na sequência do texto.¹⁵⁰⁻¹⁵⁶

Os resultados obtidos no trabalho de Fullana *et al.*¹⁵⁰ demonstraram que mais de 70% dos compostos presentes em três bio-óleos de diferente natureza (celulose, lignina e lodo de esgoto) foram identificados utilizando a GC×GC/TOFMS, enquanto somente 47 % utilizando a GC monodimensional (1D -GC).

A eficiência de separação da GC×GC também foi demonstrada no trabalho de Marsman,¹⁵¹ onde foi observado uma série de coeluições de compostos utilizando a GC monodimensional, enquanto a GC×GC apresentou significativamente maior resolução cromatográfica, em uma análise da mesma amostra de bio-óleo de faia. Em outro trabalho do mesmo grupo de pesquisa,¹⁵⁴ a técnica GC×GC/TOFMS foi utilizada para a identificação e classificação em grupos de compostos presentes em um bio-óleo de pirólise e um bio-óleo hidroxigenado (HDO) derivados de madeira de faia, os quais foram obtidos num processo de pirólise rápida. Foram classificados 250 e 350 compostos presentes no bio-óleo e no HDO, respectivamente.

Sfetsasa *et al.*¹⁵³ aplicaram a técnica GC×GC/TOFMS para uma análise quantitativa e qualitativa de três diferentes bio-óleos. Uma média de 300 compostos foram detectados e identificados nas três amostras utilizando o *software ChromaTof*. Os compostos foram agrupados, de acordo com suas respectivas funções químicas, em sete classes. Para a análise quantitativa foram selecionados onze compostos. Com o intuito de comparar os resultados, esses compostos foram quantificados também utilizando a técnica GC-FID. De acordo com os autores a GC×GC/TOFMS demonstrou um grande potencial para um mapeamento eficaz de bio-oleos e para a quantificação de compostos.

Moraes *et al.*¹⁵⁵, empregaram a técnica GC×GC/TOFMS para caracterizar qualitativamente bio-óleos provenientes da casca de arroz e caroço de pêssego. Os autores identificaram tentativamente 106 e 223 compostos, respectivamente. Os compostos majoritários foram fenóis e cetonas na palha de arroz, guaiacol e furfural no caroço de pêssego. Em outro trabalho¹⁵⁷, os mesmos autores realizaram uma investigação dos principais compostos presentes no bio-óleo da palha da cana-de-açúcar após extração da fase aquosa com diclorometano, pois o bio-óleo obtido apresentou grande quantidade de água (97,4%). Na análise deste bio-óleo por GC×GC/TOFMS foram tentativamente identificados 123 compostos, correspondendo a 42,1% da área total detectada do diagrama de cores.

Tessarolo *et al.*¹⁵⁸ utilizaram a técnica GC×GC/TOFMS para a caracterização de amostras de bio-óleo proveniente da pirólise rápida de casca de madeira de pinho e de cachos vazios da fruta palma. Em relação aos resultados obtidos, no bio-óleo de casca de madeira de pinho foram detectados 857 picos, 77% destes com similaridade superior a 700, enquanto no bio-oleo de cachos vazios da fruta palma foram detectados 631 picos, 86% destes com similaridade maior que 700. De acordo com os autores, a grande capacidade de separação desta técnica permitiu a detecção e caracterização de diversos compostos, principalmente fenólicos.

Silva *et al.*¹⁵⁶ determinaram a composição do bio-óleo obtido a partir da pirólise lenta dos resíduos gerados do processo de extração do óleo das sementes da planta de mamona (torta das sementes) utilizando a GC×GC/TOFMS. Foram tentativamente identificados 408 compostos que correspondem a hidrocarbonetos, compostos oxigenados, nitrogenados e sulfurados.

Recentemente, a técnica GC×GC acoplada ao espectrômetro de massa quadrupolar (qMS) foi utilizada para a análise da fração mais polar de uma amostra de bio-óleo de serragem de madeira (Lignocel). Para isso, realizou-se uma extração alcalina do bio-óleo seguido de uma extração líquido-líquido do extrato alcalino usando hexano, diclorometano e clorofórmio como solventes extratores. De acordo com os autores, foram tentativamente identificados 130 compostos, principalmente fenólicos e cetonas. O poder de separação da

técnica foi demonstrado através da análise da amostra por GC/qMS, com a qual foi possível identificar tentativamente somente 35 compostos. Assim, a técnica permitiu uma qualificação semiquantitativa dos compostos extraído do bio-óleo. Em relação à GCxGC/qMS, o detector (qMS) é robusto, simples reprodutivo e com um custo menor quando comparado ao TOFMS.

32

2.6 Estudos sobre bio-óleo no Brasil

O laboratório de pesquisa no qual este trabalho foi desenvolvido - Laboratório de Química Analítica Ambiental e Oleoquímica (LAAO) - representa um excelente centro de pesquisa na área de fontes renováveis de energia e ou produtos químicos, em nível nacional, pois apresenta um complexo tecnológico moderno, que possibilita uma série de estudos de amostras provenientes destas fontes, na área de caracterização cromatográfica de amostras, em virtude da diversidade dos equipamentos que dispõe, incluindo cromatógrafos gasosos mono e bidimensionais e cromatógrafos líquidos.

Os trabalhos com fontes renováveis de energia foram iniciados no ano de 2008, com o desenvolvimento do primeiro equipamento para fazer pirólise, em pequena escala, do laboratório. O pirolisador foi desenvolvido no Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS) composto, basicamente, por um forno tubular especial para altas temperaturas, por um reator de quartzo e por um condensador.

Os trabalhos de mestrado de Almeida ¹⁵⁹ e Georges ¹⁶⁰ foram baseados em otimizações do sistema de forma a torná-lo mais eficiente. Com o reator na sua melhor condição, os mesmos autores passaram a otimizar as condições para o processo de pirólise rápida para as biomassas de casca de arroz e de palha de cana-de-açúcar produzida no estado do Rio Grande do Sul. Almeida ¹⁵⁹ caracterizou por GC/MS os compostos gasosos gerados durante o processo de pirólise da casca de arroz e também do bio-óleo obtido. Tanto o bio-óleo, quanto o material volátil apresentaram grande quantidade de compostos oxigenados, principalmente, fenóis, cetonas e ácidos carboxílicos. O resíduo sólido apresentou alto teor de cinzas. Georges ¹⁶⁰ caracterizou o material volátil gerado na pirólise e o bio-óleo obtido da palha da cana-de-açúcar, também empregando a GC/MS e posterior análise por GCxGC/TOFMS. A composição química em ambas as amostras foi similar, apresentando principalmente compostos oxigenados e alguns hidrocarbonetos. Os resultados da composição do bio-óleo empregando o reator de pirólise foram publicados em 2011. ¹⁵⁷

O trabalho de doutorado de Moraes ¹⁶¹ consistiu em uma caracterização minuciosa de bio-óleos provenientes da pirólise rápida de vários resíduos agrícolas gerados no Rio Grande do Sul (bagaço de laranja, serragem de eucalipto, casca de arroz, palha de cana-de-açúcar e caroço de pêssigo) e resíduo capim elefante, proveniente do Rio Grande do Norte.

Foram desenvolvidas metodologias analíticas baseada na GCxGC acoplada ao TOFMS e ao detector por ionização em chama FID (do inglês “*Flame Ionization Detector*”) para avaliar a composição química dos bio-óleos produzidos pela pirólise das diferentes biomassas. Além disso, o potencial das técnicas GCxGC frente à técnica cromatografia gasosa monodimensional foi comparado. Os principais compostos tentativamente identificados em ambos os bio-óleos corresponderam a fenóis e cetonas. Este trabalho resultou na publicação de dois artigos.^{155,162}

Barbará¹⁶³ e Maciel¹⁶⁴ desenvolveram métodos para a análise de compostos orgânicos presentes na fase aquosa do bio-óleo de palha de cana-de-açúcar. Para isso, as autoras otimizaram os processos de extração dos compostos orgânicos a partir do uso das técnicas de extração em fase sólida - SPE (do inglês “*Solid Phase Extraction*”) e extração líquido-líquido - LLE (do inglês “*Liquid Liquid Extraction*”). Com os métodos otimizados, as autoras analisaram a composição das fases aquosas dos bio-óleos provenientes da pirólise rápida da palha de cana-de-açúcar. Os compostos foram identificados através do uso das técnicas GC/qMS e GCxGC/TOFMS. As amostras apresentaram grande percentual de compostos fenólicos. Barbará¹⁶³ analisou também os constituintes semi-voláteis presentes nas amostras. Para isso, a autora otimizou um método usando a microextração em fase sólida – SPME (do inglês “*Solid Phase Micro-Extraction*”).

Faccini¹⁶⁵ avaliou a potencialidade dos resíduos gerados por uma indústria de processamento de celulose (serragem do resíduo do digestor e do lodo da estação de tratamento de efluentes – ETE) para a produção de bio-óleos e desenvolveu um planejamento experimental para o processo de pirólise, que foi realizado com o reator do laboratório. Foram analisados os produtos obtidos nos gases condensáveis e não condensáveis do processo de pirólise das diferentes biomassas. A caracterização das amostras foi feita com o uso das técnicas GC/qMS e GCxGC/TOFMS. De acordo com os resultados, os bio-óleos apresentaram diferenças nas composições, principalmente em relação ao bio-óleo proveniente do lodo. Entretanto, todos os bio-óleos obtidos apresentam uma composição com compostos de valor agregado, como fenóis e hidrocarbonetos. Este estudo gerou a publicação de dois artigos.^{166, 167}

Torri¹⁶⁸ desenvolveu seus estudos com base na otimização do processo de pirólise para a geração de bio-óleos a partir dos resíduos de serragem de *Eucalyptus sp* e *Picea abies*. Após as otimizações dos processos de pirólise, foi realizada uma comparação entre os bio-óleos obtidos em reator de leito fixo (FB) e em reatores de leito fluidizado borbulhante (BFB). De acordo com a autora, o maior rendimento de bio-óleo foi obtido pelo processo de pirólise BFB (~70%), enquanto o processo FB teve um rendimento em torno de 50%. A análise da composição dos bio-óleos foi feita empregando a GCxGC/TOFMS. Os resultados

demonstraram que ambos os bio-óleos apresentaram grande percentual de fenóis e cetonas.

Cunha ¹⁶⁹ desenvolveu um método de fracionamento pressurizado para diminuir a complexidade de amostras de bio-óleo e desta forma, facilitar a análise da composição das mesmas. O método foi desenvolvido para uma amostra de bio-óleo produzida pela pirólise rápida da palha de cana-de-açúcar fornecida pela empresa Petrobrás. O bio-óleo bruto e suas frações foram analisados através da técnica GC×GC/qMS. Este foi o primeiro uso da GC×GC acoplada ao analisador de massas quadrupolar (qMS) para a caracterização de bio-óleo do mundo. Cunha ¹⁶⁹ usou índice de retenção com programação linear de temperatura – LTPRI para a confirmação da identificação de alguns compostos nas amostras. Foi realizada também, uma análise quantitativa dos compostos majoritários presentes no bio-óleo. De acordo com a autora, o fracionamento foi eficiente, pois promoveu uma melhor seletividade dos compostos nas frações. ¹⁶⁹ Os resultados deste estudo foram publicados em um artigo. ¹²⁹

Schneider ¹⁷⁰ avaliou durante seus estudos, a extração de compostos mais polares, como fenóis, do bio-óleo produzido pela pirólise rápida da palha de cana-de-açúcar, através da extração aquosa alcalina (FAAL). O autor analisou a composição do extrato obtido com a FAAL e também a fase oleosa (FO) gerada nessa extração. As duas amostras foram analisadas por GC/qMS e por GC×GC/qMS. Os resultados demonstraram um aumento na concentração de fenóis na FAAL em relação a FO e ausência de hidrocarbonetos na FAAL. O procedimento foi repetido para uma amostra de bio-óleo obtido de serragem lignocel. O estudo de Schneider foi publicado em um artigo. ³²

Onorevoli ¹⁷¹ avaliou o aproveitamento do resíduo sólido (torta residual) gerado das extrações do óleo da semente de *Crambe Abyssinica* para a produção de bio-óleo através da pirólise rápida. As amostras de bio-óleo foram caracterizadas através do uso das técnicas GC/qMS e da GC×GC/TOFMS. Os resultados deste estudo foram publicados em um artigo. ¹⁷²

Primas ¹⁷³ baseou seus estudos na otimização do processo de pirólise rápida para produzir bio-óleo a partir de borra de café. Para diminuir a complexidade da amostra do bio-óleo, este passou por um fracionamento pressurizado. A caracterização do bio-óleo e das frações foi feita através das técnicas GC/qMS e GC×GC/TOFMS.

Lazzari ¹⁷⁴ estudou o potencial dos resíduos gerados pela indústria de processamento de manga (amêndoa e endocarpo) para a produção de bio-óleo e realizou uma otimização do processo de pirólise no reator do laboratório. A composição do bio-óleo foi feita através da GC×GC/TOFMS. Os bio-óleos obtidos dos diferentes resíduos da manga apresentaram diferenças na composição, mas em ambos, os majoritários corresponderam a compostos oxigenados.

Migliorini ¹⁷⁵ baseou seu trabalho na análise qualitativa e semiquantitativa de bio-óleos e das suas respectivas fases aquosas, obtidos pela pirólise rápida da palha de cana-de-açúcar e do caroço de pêssego. A análise das amostras foi feita empregando o GCxGC/TOFMS. O estudo de Migliorini foi publicado em um artigo. ¹⁷⁶

Schena ¹⁷⁷ caracterizou o bio-óleo obtido a partir da pirólise rápida da fibra de coco usando dois processos de melhoramento: um anterior ao processo de pirólise (extração da fibra de coco) e outro posterior (*clean up* do bio-óleo). As amostras geradas por esses processos foram analisadas através da GCxGC/TOFMS. Este trabalho foi publicado em um artigo. ¹⁷⁸

Estudos com recentes publicações na área de aproveitamento de diferentes biomassas para a geração de bio-óleo estão sendo desenvolvidos no centro de pesquisa da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), coordenado por Débora Azevedo. ^{156, 158, 179}

Comparando aos estudos mencionados, o presente trabalho apresenta como diferencial uma avaliação da influência da pirólise catalítica do bagaço da cana-de-açúcar com o catalisador ZSM-5 nas propriedades do bio-óleo obtido, com o intuito de viabilizar maior aplicação para o bio-óleo. Para diminuir a complexidade e facilitar a identificação dos compostos presentes no bio-óleo, foi proposto também um fracionamento deste em coluna aberta preparativa, uma vez que, foram observados resultados promissores no trabalho anterior que avaliou o uso do fracionamento em coluna aberta na caracterização do bio-óleo obtido por serragem de lignocel. Para a caracterização completa dos bio-óleos avaliados neste trabalho, foram analisadas também as fases aquosas destes, através da extração dos compostos orgânicos presentes nestas fases. Todas as amostras obtidas foram analisadas empregando a técnica GCxGC/TOFMS.

3 PARTE EXPERIMENTAL

3 PARTE EXPERIMENTAL

3.1 Amostras

Os bio-óleos estudados neste trabalho foram produzidos a partir da pirólise rápida de duas biomassas distintas: serragem de fibras naturais de madeira macia (produto comercial Lignocel BK-40/90), fornecida pela empresa J. Rettenmaier & Söhne GmbH e bagaço de cana-de-açúcar, oriunda de usinas da cidade de São Paulo. Ambos os bio-óleos foram produzidos pelo CENPES/Petrobrás, situada na cidade do Rio de Janeiro, RJ. A separação das fases do bio-óleo foi realizada na própria empresa, sendo encaminhadas para o laboratório em frascos separados, contendo a fase oleosa que foi considerada como bio-óleo propriamente dito e denominada **BO**, e a fase aquosa, denominada **FA**.

A identificação das amostras está descrita a seguir:

- **BO SE** e **FA SE**, referentes ao bio-óleo de serragem (Lignocel) e sua respectiva fração aquosa obtida com a pirólise não catalítica, realizada a 550 °C.

- **BO BC** e **FA BC**, referentes ao bio-óleo de bagaço de cana-de-açúcar e sua respectiva fração aquosa obtida com a pirólise não catalítica, realizada a 550 °C.

- **BO BC CAT** e **FA BC CAT**, referentes ao bio-óleo de bagaço de cana-de-açúcar e sua respectiva fração aquosa obtida com a pirólise catalisada com zeólita ZSM-5, também a 550 °C.

O pH das fases aquosas dos bio-óleos avaliados neste trabalho variou entre 2 a 2,5.

3.2 Materiais e reagentes

Os reagentes empregados foram sílica gel 60 (0,063-0,200mm, 70-230 mesh) previamente ativada em forno a 140 °C por 4 horas (Merck, Darmstadt, Alemanha); solventes orgânicos (acetona, diclorometano, n-hexano, tolueno, acetato de etila e metanol), grau analítico ou equivalente (Merck, Darmstadt, Alemanha) e sulfato de sódio anidro

(Cetus, Santo Amaro, São Paulo, Brasil), previamente ativado em estufa a 200°C por 12 horas. Para a SPE, foi utilizado um cartucho comercial C₁₈, (sílica modificada com grupos octadecil) de 500 mg e capacidade de 3 mL da Agilent (Palo Alto, Califórnia, EUA). Os gases utilizados para as análises cromatográficas foram nitrogênio e hélio, sendo o nitrogênio também usado na pré-concentração das amostras. A pureza destes gases é superior a 99,999%. Todos os gases e também o nitrogênio líquido necessário para operar o modulador do sistema GCxGC, foram adquiridos da Linde Gases (Canoas, RS, Brasil).

3.3 Processo de pirólise das biomassas

Os bio-óleos de serragem e de bagaço de cana-de-açúcar (catalítico e não catalítico) foram obtidos através da pirólise rápida na temperatura de 550 °C, realizada na planta catalítica piloto da Petrobrás, situada no CENPES, na cidade do Rio de Janeiro, RJ.

Para a pirólise de serragem, as partículas usadas no processo apresentaram tamanho entre 300 µm e 500 µm.¹⁸⁰

Na pirólise catalítica do bagaço da cana-de-açúcar, foi usado o catalisador comercial ZSM-5 (do inglês “*Zeolite Socony Mobil-5*”).

O equipamento de pirólise usado consiste de um reator de leito fluidizado com injeção de nitrogênio. O reator está conectado a um sistema de alimentação de biomassa, que opera com alimentação contínua. Outros detalhes da planta catalítica podem ser obtidos no trabalho de Mendes *et al.*¹⁸⁰

3.4 Fracionamento das amostras de bio-óleo

Para diminuir a complexidade das amostras de bio-óleos utilizou-se a cromatografia líquida preparativa em coluna aberta (PLC, do inglês “*Preparative Liquid Chromatography*”) para fazer o fracionamento. O processo utilizado foi baseado no trabalho desenvolvido por Caramão¹⁸¹, com pequenas modificações relacionadas com as quantidades de amostra e número de frações produzidas, uma vez que o procedimento proposto originalmente era para amostras de alcatrão de carvão. O fracionamento (denominado PLC-6, por gerar 6 frações) foi realizado, pesando-se aproximadamente 0,5 g de bio-óleo e dissolvendo-se este em 10 mL de metanol, a esta solução foi adicionada a 1 g de sílica ativada, misturando-se completamente e deixando-se o metanol evaporar até a formação de um pó fino e seco. Esta mistura foi transferida ao topo da coluna cromatográfica, previamente empacotada com 20 g de sílica ativada em emulsão com hexano. Em seguida, o bio-óleo foi eluído utilizando solventes com diferentes polaridades, gerando 6 frações: BOF1 com hexano/tolueno (1:1); BOF2 com tolueno/diclorometano (1:1); BOF3 com diclorometano; BOF4 com acetona/

diclorometano (1:1); BOF5 com acetona/acetato de etila (1:1) e BOF6 com metanol. O volume de eluente para cada fração foi de 50 mL. O procedimento foi realizado em triplicata e pode ser visualizado na **Figura 7**. Os solventes foram removidos por evaporação em capela à temperatura ambiente e o excesso final foi removido utilizando-se um fluxo suave de N_2 . As três primeiras frações (BOF1, BOF2, BOF3) foram solubilizadas em diclorometano, as frações BOF4 e BOF5 foram solubilizadas em acetona, enquanto a fração BOF6 foi solubilizada com metanol. Todas as frações foram transferidas para frascos de 1 mL, para a análise cromatográfica.

Em virtude da semelhança entre os compostos presentes nas frações F1 e F2; F4 e F5 observada na análise cromatográfica das frações obtidas com o fracionamento do bio-óleo obtido a partir da biomassa de serragem, essas frações foram unidas no fracionamento dos bio-óleos obtidos a partir do bagaço da cana-de-açúcar, passando a ser denominadas como: **BO F1+F2** e **BO F4+F5** para os bio-óleos catalítico e não catalítico.

Para avaliar os resultados obtidos no fracionamento em coluna aberta, as amostras dos bio-óleos brutos foram analisadas cromatograficamente. Para isto, preparou-se soluções em acetona de em torno de 10000 mg L^{-1} para o bio-óleo de serragem e em torno de 20000 mg L^{-1} para os bio-óleos catalítico e não catalítico de bagaço de cana-de-açúcar.

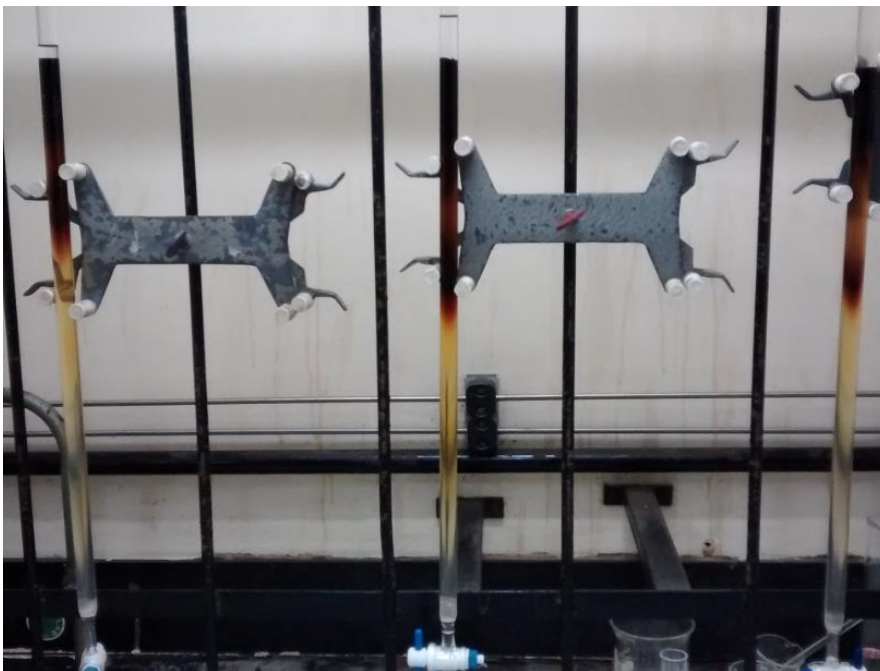


Figura 7: Sistema de fracionamento em coluna aberta das amostras de bio-óleo.

3.5 Métodos de Extração dos Compostos Orgânicos da Fase Aquosa

Os métodos de extração dos compostos orgânicos da fase aquosa do bio-óleo descritos a seguir, foram baseados no trabalho desenvolvido por Maciel¹⁶⁴ e Barbará¹⁶³.

3.5.1 Extração líquido-líquido (LLE)

Para a LLE, foi utilizado um funil de separação de 10 mL, onde foi adicionado 2 mL da fração aquosa do bio-óleo e 1,6 mL de n-hexano. A mistura foi agitada, após separou-se a fase aquosa e orgânica. A fração aquosa foi então extraída mais duas vezes com o mesmo volume de n-hexano. O mesmo procedimento de extração da fase aquosa foi repetido utilizando o diclorometano como solvente. A extração da fase aquosa foi finalizada com o uso de 1,6 mL de clorofórmio.

Os extratos obtidos (n-hexano, diclorometano e clorofórmio) foram misturados em uma única fração orgânica, na qual foi então adicionado 2 g de sulfato de sódio anidro a fim de retirar a umidade presente na amostra.

3.5.2 Extração em fase sólida (SPE)

A SPE foi realizada utilizando-se o cartucho comercial C₁₈. Inicialmente, realizou-se o condicionamento do cartucho empregando 4 mL de metanol e 20 mL de água Milli-Q.

Para a extração, empregou-se 2 mL de amostra e os analitos foram eluídos com 3 mL de n-hexano, 3 mL de diclorometano e 3 mL de clorofórmio. Os três extratos obtidos (n-hexano, diclorometano e clorofórmio) foram misturados em uma única fração orgânica, a exemplo do que foi realizado para a LLE.

A SPE foi empregada somente para a extração dos compostos orgânicos presentes na fase aquosa do bio-óleo de serragem, pois, constatou-se através da análise cromatográfica dos extratos obtidos a partir da LLE e SPE desta amostra, que não havia diferença significativa entre os compostos presentes nestes extratos.

3.5.3 Rendimento dos extratos

Os extratos obtidos em ambas as técnicas de extração foram evaporados em capela à temperatura ambiente e o excesso de solvente foi removido utilizando-se um fluxo suave de N₂, também em capela. Após evaporação, os extratos foram pesados a fim de se obter o rendimento em massa, o qual foi calculado através da equação abaixo:

$$\text{Rendimento (\%)} = \frac{\text{massa do extrato}}{\text{massa de amostra aquosa}} \times 100$$

Para a análise cromatográfica foram preparadas soluções contendo 5000 mg L⁻¹ de cada extrato em diclorometano.

3.6 Análises das amostras através da técnica GC×GC/TOFMS

As análises foram realizadas em um cromatógrafo gasoso Agilent 6890N (Agilent Technologies, Palo Alto, CA, EUA) acoplado a um espectrômetro de massa por tempo de voo (TOFMS) Pegasus IV (LECO, St. Joseph, MI, EUA). O cromatógrafo possui um amostrador automático Combi PAL (CTC Analytics AG, Zwingen, Suíça), um forno secundário e um modulador térmico de dois estágios com quatro jatos de nitrogênio (dois jatos quentes e dois frios, que são resfriados por vapor de nitrogênio líquido, LECO, St. Joseph, MI, EUA). Todas as colunas cromatográficas empregadas nas análises foram adquiridas da Agilent Technologies - J&W Scientific (Palo Alto, CA, EUA).

3.6.1 Análise do bio-óleo de serragem, das suas frações e dos extratos orgânicos da respectiva fase aquosa

A amostra de bio-óleo, suas frações obtidas com o fracionamento e os extratos orgânicos provenientes da sua fase aquosa foram analisadas empregando uma coluna apolar DB-5 (5% fenil – 95% metilpolisiloxano) com dimensões de 50 m x 250 μm x 0,25 μm na primeira dimensão (¹D) e uma coluna polar DB-17MS (50% fenil – 50% metilpolisiloxano) com dimensões de 2,15 m x 180 μm x 0,18 μm na segunda dimensão (²D).

As demais condições do método cromatográfico para a análise do bio-óleo bruto e suas frações obtidas com o fracionamento deste, encontram-se na **Tabela III**.

Tabela III – Parâmetros cromatográficos do método para a análise do bio-óleo bruto e suas frações.

Parâmetro	Condição
Temperatura do Injetor	280 °C
Temperatura da linha de transferência	320 °C
Temperatura do detector	250 °C
Temperatura do modulador	25 °C
Tipo de injeção	sem divisão de fluxo (modo <i>splitless</i>)
O fluxo do gás de arraste (Hélio)	1,2 mL min ⁻¹
Energia aplicada na fonte de ionização por impacto eletrônico	70 eV
Voltagem do detector	1750 V
Período de modulação	12 s
Pulso quente e Pulso frio	4,8 s (Pulso quente) e 1,2 s (Pulso frio)
ΔT entre os fornos	10 °C
Programação de temperatura do forno	60 °C por 0,2 min; taxa de aquecimento de 2 °C min ⁻¹ até 300 °C, mantido por 1 min
Intervalo de massas de íons adquiridos	50 a 500 Daltons
Taxa de aquisição dos espectros	100 Hz

As condições do modulador e dos aquecimentos do forno principal e secundário para a análise dos extratos orgânicos da fase aquosa do bio-óleo de serragem encontram-se descritas na **Tabela IV**, às demais condições foram às mesmas utilizadas para a análise do bio-óleo e suas frações, que estão na **Tabela III**.

Tabela IV – Condições do modulador e do programa de temperatura do forno utilizadas na análise dos extratos orgânicos da fase aquosa.

Parâmetro	Condição
Temperatura do modulador	30 °C
Período de modulação	9 s
Pulso quente e Pulso frio	0,9 s e 3,6 s
ΔT entre os fornos	15 °C
Programação de temperatura do forno	40 °C por 0,2 min; taxa de aquecimento de 3 °C min ⁻¹ até 280 °C, mantido por 5 min

3.6.2 Análise do bio-óleo de bagaço de cana-de-açúcar, das suas frações e dos extratos orgânicos das respectivas fases aquosas

A análise cromatográfica das amostras provenientes do bio-óleo obtido com a pirólise catalítica e não catalítica do bagaço da cana-de-açúcar foi realizada empregando uma coluna DB-5 (60 m x 250 μm x 0,25 μm) na ¹D e uma coluna DB-17ms (2,15 m x 180 μm x 0,18 μm) na ²D. Foi utilizado Hélio como gás de arraste com fluxo 1,0 mL min⁻¹ e injeção das amostras com divisão de fluxo, do inglês *split* na proporção 1/20 para as amostras mais concentradas e sem divisão de fluxo, do inglês *splitless*, para as amostras menos concentradas. A temperatura do injetor, da linha de transferência e da fonte de íons foi mantida a 280 °C, 300 °C e 250 °C, respectivamente. A temperatura inicial do forno foi de 40 °C, mantido por 1 min, a taxa de aquecimento foi de 2 °C min⁻¹ até 280 °C mantido por 12 min. A temperatura do modulador foi 25 °C, o período de modulação de 9 s e os pulsos quente e frio de 3,6 s e 0,9 s, respectivamente. A diferença de temperatura entre os dois fornos foi de 10 °C. As condições do espectrômetro de massa foram as seguintes: energia de ionização de 70 eV, voltagem do detector de 1460 V, intervalo de massas de íons adquiridos de 45 a 450 Daltons e a taxa de aquisição de 100 Hz.

3.7 Processamento dos dados e classificação dos compostos

O cromatograma do íon total (do inglês “*Total Ion Current Chromatogram*” - TIC) e o cromatograma do íon extraído (do inglês “*Extracted Ion Current Chromatogram*” - EIC) para cada amostra foram adquiridos através do processamento dos dados, utilizando um método de processamento do *software ChromaTof* versão 3.32, incluindo ferramentas como mecanismo de busca do programa (*peak finder*) e deconvolução espectral. Para aceitar um composto “tentativamente identificado” foi realizada uma análise detalhada no espectro de massa de cada composto e a posição relativa do mesmo no diagrama de cores.

Para a identificação de todos os compostos presentes na amostra construiu-se um método de processamento onde os dados foram apresentados em um gráfico de contorno em duas dimensões. Em seguida, as áreas dos picos de solvente e de sangria de colunas foram excluídas utilizando um recurso do *software ChromaTof*.

Para realizar uma classificação dos compostos em grupos químicos e uma análise semiquantitativa, dados como tempos de retenção e áreas dos picos, foram extraídos e processados utilizando o *software Microsoft Excel™*. Para a análise semiquantitativa foi avaliada a contribuição da área de cada composto em relação à área total dos compostos tentativamente identificados. Para isso fez-se normalização de área, ou seja, a soma de todas as áreas dos picos da amostra foi considerada 100% e para cada pico foi atribuída

uma percentagem correspondente a sua área. As áreas dos solventes e da sangria não foram consideradas.

A identificação tentativa dos compostos foi realizada comparando os espectros de massa do composto desconhecido com os espectros da biblioteca NIST. Em relação às classes químicas dos compostos, estes foram classificados genericamente como: hidrocarbonetos aromáticos, saturados e insaturados, ácidos carboxílicos, álcoois, aldeídos, ésteres, éteres, cetonas, compostos nitrogenados, açúcares e fenóis. As lactonas foram classificadas no grupo das cetonas devido a semelhanças estruturais e à localização espacial no espaço de separação bidimensional.

Alguns critérios foram adotados para a classificação dos compostos presentes nas amostras:

- ✚ As funções mistas foram consideradas uma única vez, levando em consideração o nome oficial do composto: Exemplos: hidroxil benzaldeído, classificado como aldeído; hidroxil hexanona, classificada como cetona; metóxi furano, classificado como éter.
- ✚ Os compostos ramificados, devido à dificuldade em definir exatamente a localização da ramificação foram identificados apenas com o número total de carbonos. Ex.: 3 etil 2-pentanona, denominado heptanona.
- ✚ As cadeias alquílicas em compostos cíclicos, devido à dificuldade em considerar a posição do substituinte no anel e o tamanho deste substituinte, também foram simplifadamente representadas pela letra C seguida de um índice numérico indicando o número de carbonos na cadeia lateral. Ex.: 2 metil 3 etil fenol, denominado C3 fenol; 1,2,3 trimetil naftaleno, denominado C3 naftaleno.
- ✚ A identificação dos hidrocarbonetos também foi simplificada, pois a similaridade na biblioteca do equipamento é muito baixa para estes compostos devido à sua facilidade de sofrer quebras e rearranjos gerando picos muito semelhantes para todos os compostos durante a ionização, o que dificulta a observação do pico de peso molecular.¹⁸² Assim, os hidrocarbonetos insaturados foram chamados apenas de “hidrocarboneto insaturado” e os saturados foram denominados de “hidrocarboneto saturado”, o que pode ser claramente definido pelo espectro de massas, mas sem indicar o tamanho da cadeia, ou seja, o número de átomos de carbono, e nem as possíveis ramificações. O mesmo procedimento foi feito para os aldeídos alifáticos.

Ao final da identificação dos compostos, os mesmos foram reagrupados de acordo com o número de isômeros encontrados e classificados segundo suas áreas percentuais. Como não foram feitas análises quantitativas, com a injeção de padrões e construção de

curvas de calibração, as medidas são semiquantitativas e servem apenas para fins de comparação. A partir destes dados, foram isolados os compostos cujas áreas percentuais estavam acima de 1,0% e foram realizadas comparações.

3.8 Determinação por Índice de Retenção com Programação Linear de Temperatura (LTPRI)

Para a confirmação dos compostos tentativamente identificados foi usado o índice de retenção, desenvolvido inicialmente por Kovatz para as análises isotérmicas e modificado por van den Doll e Kratz para análises com programação linear de temperatura, LTPRI (do inglês "*Linear Temperature Programmed Retention Index*"). O valor desse índice é calculado pela **Equação 1**:^{183, 184} Os valores do LTPRI para cada composto foram comparados com os da literatura para colunas contendo como fase estacionária a composição de 5% fenil – 95% metilpolisiloxano.

Equação 1

$$LTPRI = 100n + 100 \left(\frac{RT(i) - RT(n)}{RT(n+1) - RT(n)} \right)$$

Onde: RT corresponde ao tempo de retenção, *i* representa o analito, *n* é o número de carbono da cadeia do alcano linear que elui antes do analito e *n+1* representa o número de carbonos da cadeia do alcano linear que elui depois do analito.

Para a determinação do índice de retenção dos compostos foi injetado 1 µL da mistura padrão de n-alcenos (C6-C30) no GC×GC/TOFMS sob as mesmas condições das amostras.

O tempo de retenção de cada composto foi obtido somando-se o tempo de retenção do composto na primeira dimensão com o tempo deste na segunda dimensão. O valor obtido foi então utilizado para o cálculo do índice de retenção com programação linear de temperatura (LTPRI) do composto.

O valor do índice de retenção foi calculado para cada composto da amostra, de acordo com a **Equação 1**. Os valores obtidos foram comparados com os valores da literatura. A principal base de dados de espectros de massa para LTPRI usada neste trabalho foi à biblioteca *NIST library* [disponível na internet no endereço <http://webbook.nist.gov/chemistry/>]. Somente compostos com LTPRI de até 20 unidades de

diferença, para mais ou para menos, em relação à biblioteca NIST foram considerados positivamente identificados.

O índice de retenção foi calculado apenas para as amostras oriundas da pirólise do bagaço da cana-de-açúcar.

3.9 Resumo geral da parte experimental

Um esquema geral do procedimento experimental adotado neste trabalho está apresentado na **Figura 8** (para a biomassa de serragem de lignocel) e na **Figura 9** (para a biomassa do bagaço da cana-de-açúcar).

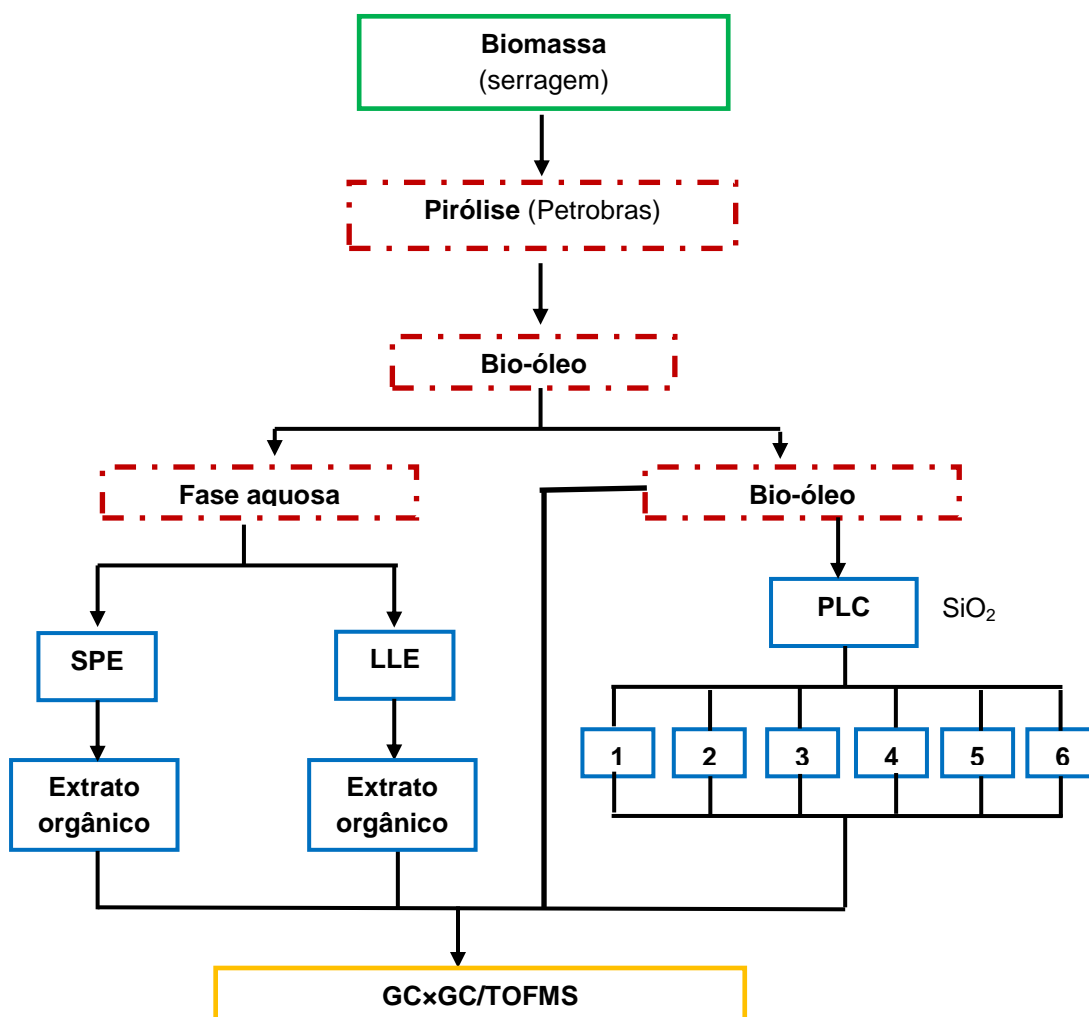


Figura 8: Fluxograma do preparo da amostra de bio-óleo proveniente da serragem para análise por GCxGC/TOFMS.

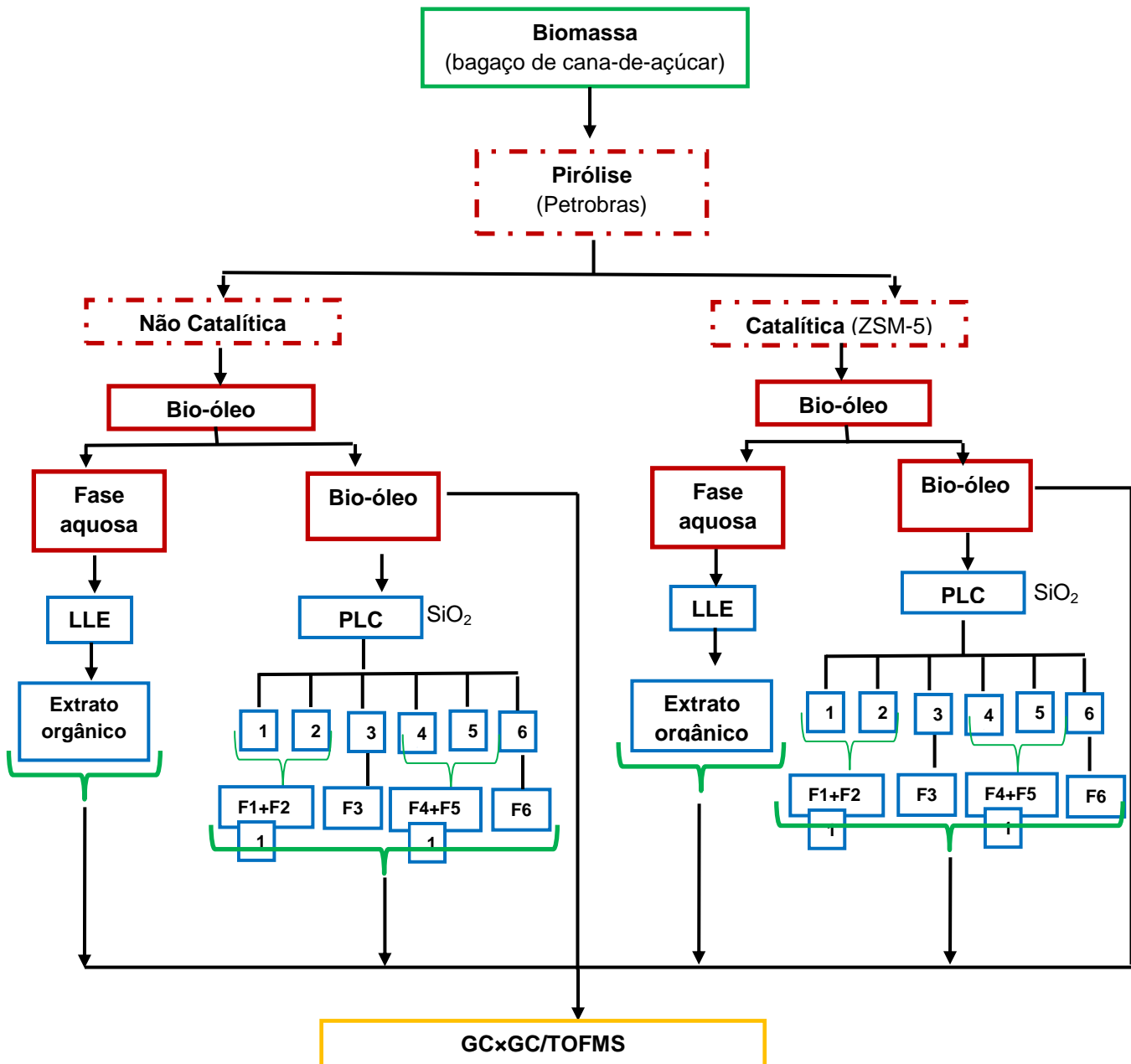


Figura 9: Fluxograma do preparo das amostras dos bio-óleos provenientes da biomassa bagaço de cana-de-açúcar para análise por GCxGC/TOFMS.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 Rendimento

4.1.1 Rendimento do fracionamento do bio-óleo e da extração dos compostos orgânicos da fase aquosa do bio-óleo proveniente da serragem

O fracionamento da amostra do bio-óleo proveniente da serragem resultou em seis frações. O rendimento total do fracionamento foi em torno de 70%, sendo que as frações obtidas com solventes mais polares BO SE F4, BO SE F5 e BO SE F6 foram as que apresentaram maior rendimento, conforme pode ser visualizado na **Tabela V**, que apresenta o rendimento do fracionamento e da extração dos compostos orgânicos da fase aquosa do bio-óleo. Estes resultados confirmam a grande quantidade de compostos polares e oxigenados presentes em amostras de bio-óleo. A fração BO SE F5 obtida com a mistura (1/1) dos solventes acetato de etila e acetona apresentou o maior rendimento, em torno de 51%, muito superior às demais frações. A fração BO SE F6 apresentou o segundo maior rendimento, reafirmando a grande polaridade dos compostos presentes nesta amostra de bio-óleo. Entretanto, não foram detectados compostos no diagrama de cores obtidos pela técnica GCxGC/TOFMS da fração 6, possivelmente devido a grande polaridade e tamanho molecular dos compostos presentes nesta fração.

Tabela V – Rendimentos do fracionamento PLC realizado no bio-óleo e da extração dos compostos orgânicos da fase aquosa do bio-óleo proveniente da serragem.

	Amostra	Rendimento em massa (%) (n = 3)
Bio-óleo	BO SEF1	1,03 ± 0,09
	BO SEF2	1,10 ± 0,11
	BO SEF3	0,75 ± 0,07
	BO SEF4	2,04 ± 0,20
	BO SEF5	51,01 ± 3,23
	BO SEF6	15,65 ± 1,12
Fase aquosa	LLE	3,40 ± 0,47
	SPE	4,00 ± 0,92

Os resultados de rendimento obtidos neste trabalho, ou seja, baixo rendimento para as frações menos polares e maiores rendimentos para as frações obtidas com solventes mais polares, estão de acordo com os obtidos no fracionamento desenvolvido por Cunha *et al.*,¹²⁹ que propôs um fracionamento pressurizado do bio-óleo produzido a partir da palha de cana-de-açúcar utilizando solventes com polaridades similares aos usados no fracionamento PLC em coluna aberta proposto neste trabalho.

O rendimento em massa % (m/m) para o extrato obtido por SPE foi ligeiramente superior ao obtido na LLE. No trabalho desenvolvido por Maciel¹⁶⁴, no qual também foi analisada uma amostra aquosa gerada durante o processo de produção do bio-óleo de palha de cana-de-açúcar, o rendimento entre as técnicas foi semelhante ao apresentado neste trabalho (5% para LLE e 6% para SPE).

4.1.2 Rendimento do fracionamento do bio-óleo e da extração dos compostos orgânicos da fase aquosa do bio-óleo proveniente do bagaço da cana-de-açúcar

O rendimento das frações obtidas com o fracionamento dos bio-óleos gerados a partir da pirólise catalítica e não catalítica do bagaço da cana-de-açúcar foi avaliado antes de juntar as frações F1 com F2 e F4 com F5 de ambos os fracionamentos.

O fracionamento PLC em coluna aberta dos bio-óleos apresentou um rendimento médio em torno de 45% para o bio-óleo não catalítico e em torno de 68% para o bio-óleo catalítico, conforme **Tabela VI**. Ambos bio-óleos apresentaram baixo rendimento para as frações mais apolares. Sendo a soma do rendimento das três primeiras frações em torno de 1% para ambos bio-óleos. O maior rendimento foi observado para as frações obtidas com os solventes mais polares (F4, F5 e F6), sendo a soma destas três frações em torno de 44% para o bio-óleo não catalítico e em torno de 67% para o bio-óleo catalítico. Estes resultados

estão de acordo com os obtidos com o fracionamento do bio-óleo de serragem (**Tabela V**) e com o fracionamento de Cunha *et al.*¹²⁹, confirmando a grande polaridade dos compostos presentes em amostras de bio-óleos produzidos por diferentes biomassas. Para o bio-óleo não catalítico a fração com maior rendimento foi a F6 (metanol), em torno de 17%, seguido pela F4 (acetona/diclorometano) em torno de 15%. Para o bio-óleo catalítico, o maior rendimento foi observado para a fração F4, em torno de 45%, seguido pela F6, onde o percentual foi em torno de 14%. Esta distribuição difere da observada no fracionamento do bio-óleo de serragem onde o maior rendimento foi para a fração 5 (acetona/acetato de etila). Esta diferença pode ser em virtude das características peculiares de cada biomassa (serragem e o bagaço de cana-de-açúcar). Entretanto esta distribuição está de acordo com o encontrado com o fracionamento da palha de cana-de-açúcar¹²⁹, onde a fração obtida com metanol apresentou o maior rendimento, equivalente ao encontrado para o bio-óleo de bagaço de cana-de-açúcar não catalítico.

Em relação à extração dos compostos orgânicos das fases aquosas dos bio-óleos do bagaço da cana-de-açúcar, o rendimento foi em torno de 6% e 5% para as fases aquosas dos bio-óleos catalítico e não catalítico, respectivamente, conforme **Tabela VI**. Esses resultados estão de acordo com o obtido com a extração dos compostos orgânicos da fase aquosa do bio-óleo de serragem e com outros trabalhos.^{163, 164}

Tabela VI - Rendimentos do fracionamento PLC realizado no bio-óleo catalítico (BO BC CAT), não catalítico (BO BC) e da extração dos compostos orgânicos da fase aquosa dos bio-óleos provenientes do bagaço da cana-de-açúcar.

Amostra	Rendimento em massa (%) (n = 3)	
	BO BC	BO BC CAT
F1	0,43±0,17	0,24±0,15
F2	0,21±0,20	0,17±0,04
F3	0,42±0,13	0,63±0,55
F4	15,22±1,28	44,50±5,33
F5	11,71±3,93	8,17±0,19
F6	16,99±0,54	14,40±0,41
LLE	5,65±0,05	4,55±0,25

4.2 Análise das amostras via GC×GC/TOFMS

4.2.1 Análise do bio-óleo de serragem

4.2.1.1 Análise do bio-óleo de serragem e das suas frações obtidas com o fracionamento PLC

O fracionamento PLC realizado na amostra de bio-óleo de serragem resultou em seis frações que foram analisadas por GC×GC/TOFMS. A **Figura 10** apresenta os diagramas de cores obtidos para o bio-óleo bruto e para as cinco frações obtidas através do fracionamento, uma vez que, não foram identificados compostos na análise da fração BO SE F6. Um resumo dos resultados pode ser visualizado nas **Tabelas VII, VIII** e na **Figura 10**.

A complexidade do perfil cromatográfico do bio-óleo bruto, o qual apresenta diversas coeluições, pode ser visualizado no diagrama de cores (**Fig. 10a**). Esta complexidade justifica o fracionamento da amostra de bio-óleo para melhorar a separação cromatográfica.

Tabela VII: Resumo dos resultados da análise GC×GC/TOFMS do bio-óleo de serragem e das suas frações obtidas pelo fracionamento PLC.

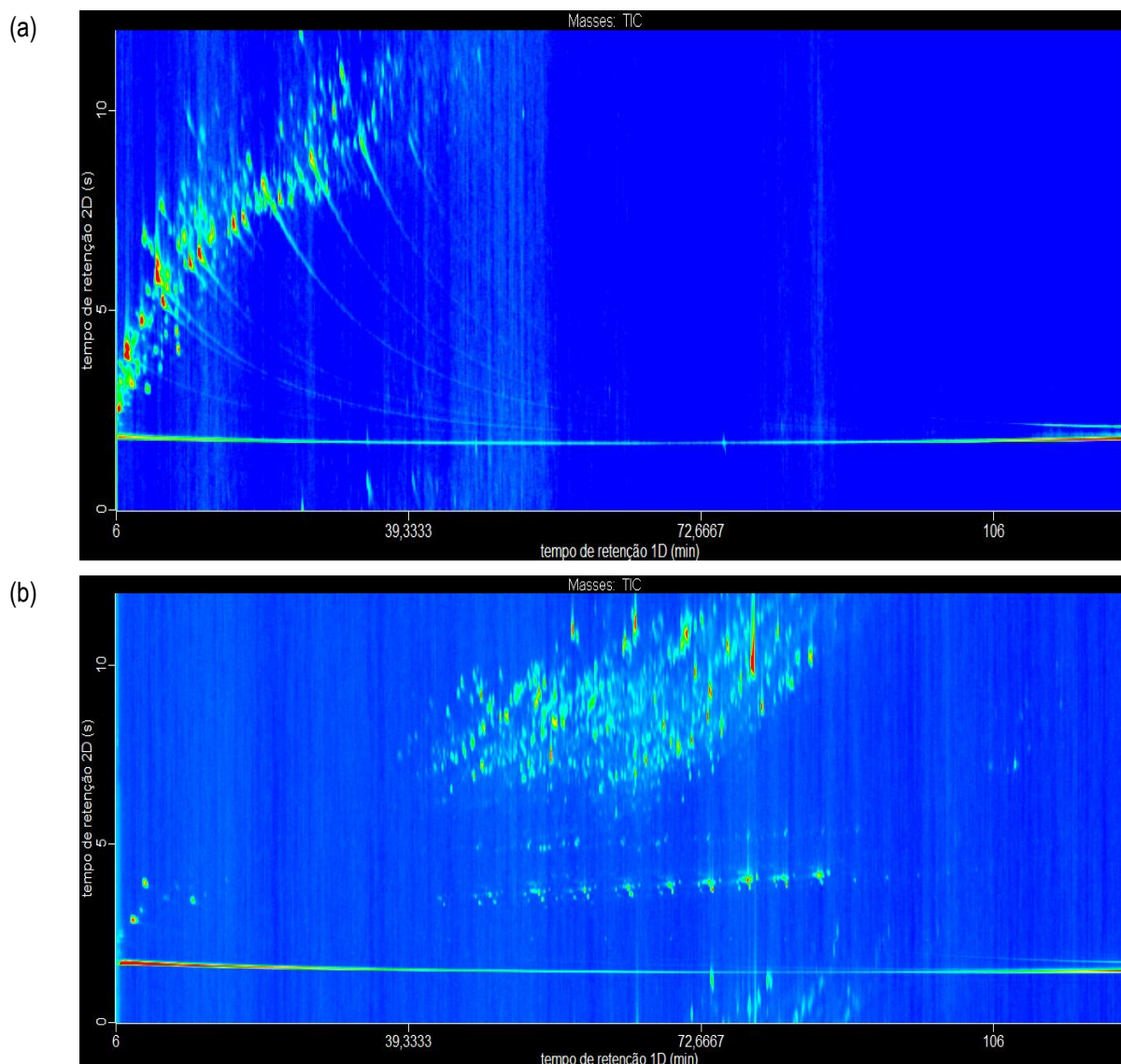
Resumo	BO SE	BO SEF1	BO SEF2	BO SEF3	BO SEF4	BO SEF5
Área total identificada*	2236158424	1698640019	389005989	76871344	1184343181	5591352263
Número de picos identificados	445	391	318	130	311	379

(*) em unidades aleatórias de área, definidas pelo software *CromaTof*.

Em relação à análise cromatográfica das frações obtidas com o fracionamento, à fração BO SE F5, eluída com mistura de acetona e acetato de etila, apresentou a maior área tentativamente identificada, seguida pela fração BO SE F1, eluída com a mistura de hexano/tolueno, e BO SE F4 eluída com acetona/diclorometano. A menor área foi obtida para a fração BO SE F3, eluída com diclorometano, seguida pela fração BO SE F2, eluída com a mistura tolueno e diclorometano, conforme **Tabela VII**. Em relação ao número de compostos tentativamente identificados, a fração BO SE F1 apresentou o maior número, 391 compostos, seguido pela BO SE F5, com 379 compostos. As frações BO SE F4 e BO SE F3 apresentaram o menor número de compostos tentativamente identificados, 311 e 130, respectivamente. Apesar da fração BO SE F4 apresentar uma grande área identificada, esta apresentou o segundo menor número de compostos tentativamente identificados, isso ocorreu em virtude da presença nesta fração de compostos com grande área percentual,

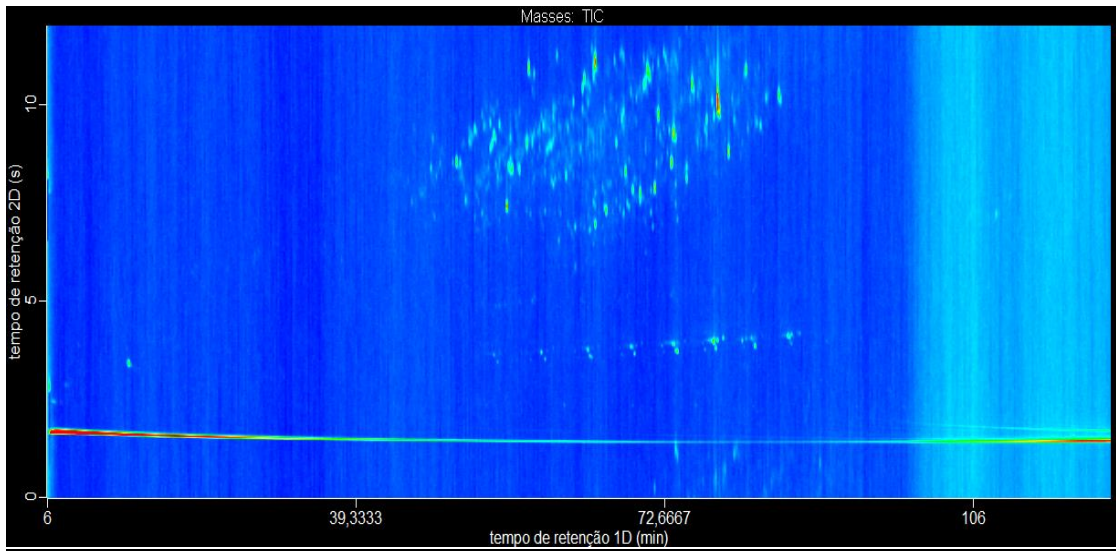
como fenóis e também devido às “caudas” observadas para estes compostos nesta fração, conforme o diagrama de cores obtido para esta fração (**Figura 10(f)**). Essas “caudas” são originadas em virtude da maior interação de determinados compostos, maior polaridade, com a coluna cromatográfica da segunda dimensão, que na configuração empregada neste trabalho, apresenta uma polaridade mais elevada. Quando verificadas essas “caudas” nos diagramas de cores, as áreas obtidas para cada pico identificado na “cauda” foram combinadas, utilizando uma ferramenta do *software ChromaTof*, em uma única área.

No bio-óleo bruto foram tentativamente identificados 445 compostos que correspondem a segunda maior área tentativamente identificada (**Tabela VII**).

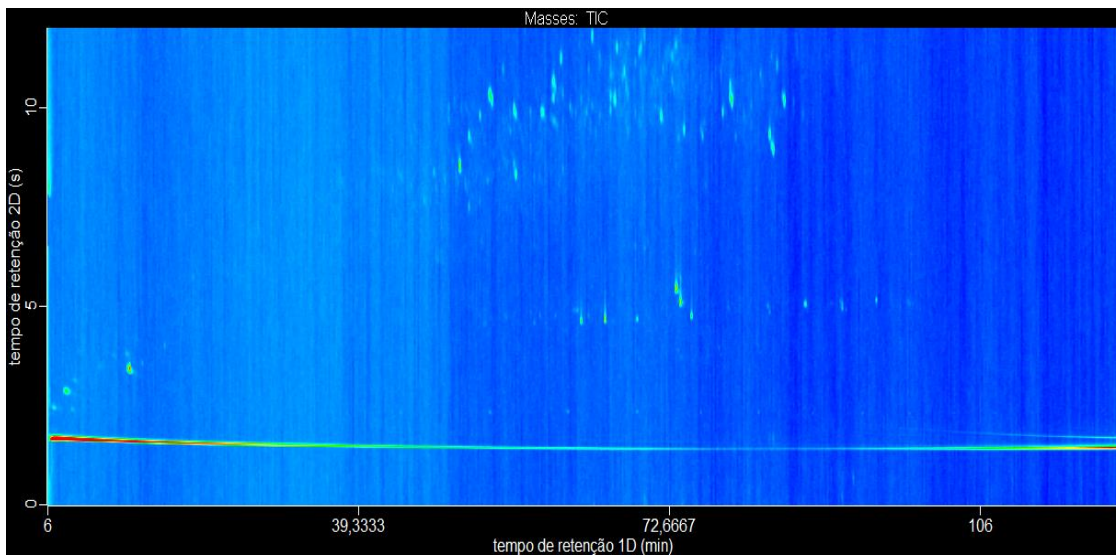


Continua...

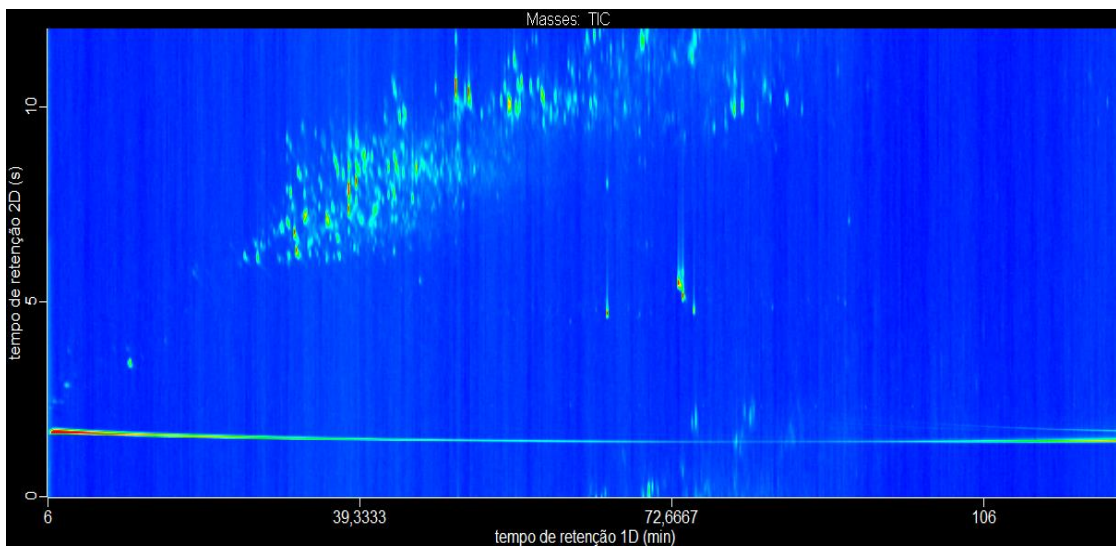
(c)



(d)



(e)



Continua...

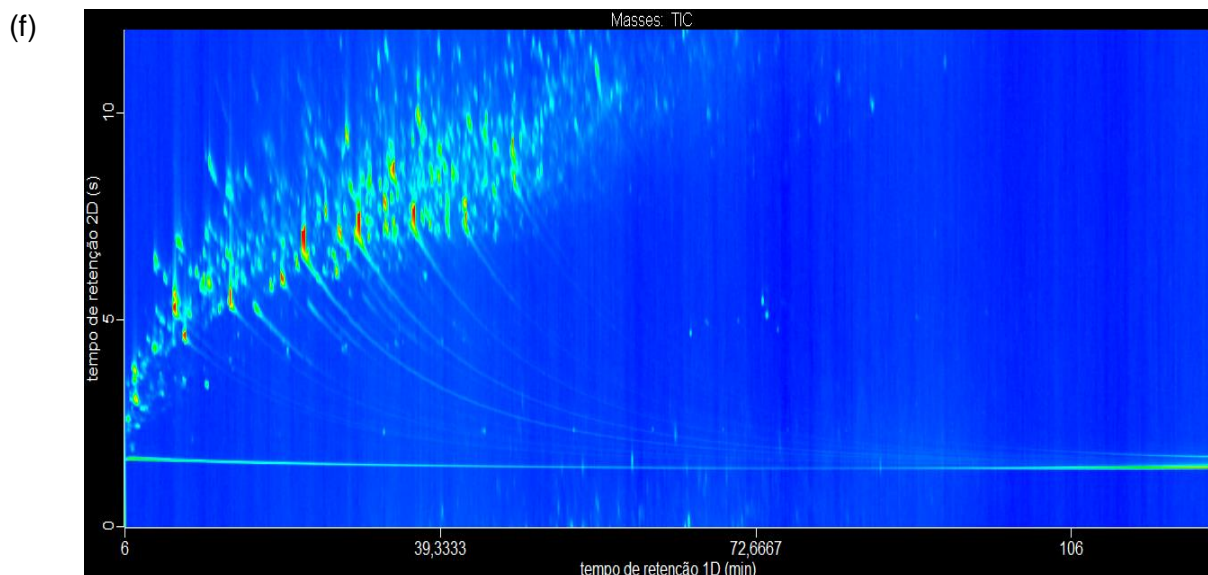


Figura 10: Diagramas de cores obtidos por GCxGC/TOFMS do bio-óleo de serragem e das suas frações obtidas pelo fracionamento PLC-6. a) Bio-óleo bruto; b)BO SE F1; c)BO SE F2; d)BO SE F3; e)BO SE F4; f)BO SE F5. *Condições cromatográficas descritas no item 3.6.1*

O fracionamento proporcionou bons resultados, pois as frações apresentaram diferentes distribuições e proporções dos compostos de acordo com as misturas de solventes utilizadas para fazer a eluição destes da coluna de fracionamento, conforme a **Tabela VIII e Figura 11**.

Os compostos tentativamente identificados no bio-óleo de serragem e nas suas frações pertencem, principalmente, a dez classes distintas: ácidos carboxílicos, álcoois, aldeídos, ésteres, éteres, cetonas, fenóis, hidrocarbonetos, derivados de açúcares e compostos nitrogenados. A composição do bio-óleo de serragem analisada neste trabalho está de acordo com a composição de outros bio-óleos originados a partir de diferentes biomassas, como casca de arroz, caroço de pêsego ¹⁵² e palha de cana-de-açúcar açúcar.

129

Os perfis da separação cromatográfica das frações BO SE F1, BO SE F2 e BO SE F3 obtidas no fracionamento do bio-óleo de serragem foram muito parecidos (**Fig. 10b, 10c, 10d**). Entretanto, a fração BO SE F3 apresentou uma menor quantidade de compostos e menor intensidade destes, conforme o digrama de cores (**Fig. 10d**). Semelhanças entre os perfis de separação também foram observadas para as frações BO SE F4 e BO SE F5 (**Fig. 10e, 10f**), sendo, o perfil destas duas últimas frações foi muito similar ao apresentado pelo bio-óleo bruto (**Fig 10a**). Essa semelhança pode ser atribuída ao maior rendimento destas duas frações em relação às demais geradas com o fracionamento proposto.

A semelhança nos perfis de separação das três primeiras frações (BO SE F1, BO SE F2, BO SE F3) reflete na composição destas, sendo hidrocarbonetos a principal classe de compostos tentativamente identificados nestas frações. Na fração BO SE F1, dos 391 picos

tentativamente identificados, 342 referem-se a hidrocarbonetos, que corresponde a 87,5%. Nas frações BO SE F2 e BO SE F3, em torno de 78,3% e 35,4%, respectivamente, dos picos tentativamente identificados correspondem a hidrocarbonetos (**Tabela VIII e Fig. 11a**).

Entre as frações obtidas com o fracionamento do bio-óleo de serragem, a BO SE F3 apresentou o menor número de compostos tentativamente identificados (130), entretanto esta apresentou um percentual razoável de picos correspondentes a compostos polares e apolares, ou seja, 24,6% dos compostos identificados nesta fração correspondem a cetonas e em torno de 35,4% corresponde a hidrocarbonetos (**Tabela VIII e Fig. 11a**). Com esses resultados pode-se afirmar que esta fração apresentou características intermediárias no fracionamento realizado no bio-óleo, onde as primeiras frações (BO SE F1 e BO SE F2) apresentaram principalmente compostos com características mais apolares, enquanto as últimas frações (BO SE F4 e BO SE F5) apresentaram mais compostos com caráter mais polar.

Nas demais frações (BO SE F4 e BO SE F5) o percentual de hidrocarbonetos foi pequeno, sendo em torno de 10,6% e 5,1% para BO SE F4 e BO SE F5, respectivamente. Ao contrário das três primeiras frações, a BO SE F4 e a BO SE F5 apresentaram uma grande quantidade de compostos com polaridade mais elevada, conforme o esperado. Fenóis e cetonas foram os compostos majoritários observados nessas frações. Sendo que na fração BO SE F4, em torno de 31,2% dos compostos tentativamente identificados correspondem a fenóis e 29,6% a cetonas. A soma destas duas classes corresponde a 60,8% dos compostos nesta fração. A fração BO SE F5 apresentou um maior percentual de cetona, 38,8% dos picos e 24,5% de fenóis, somando 63,3% do total de picos tentativamente identificados nesta fração. Tanto a fração BO SE F4 quanto a BO SE F5 apresentaram uma razoável quantidade de aldeídos e éteres, além de ácidos carboxílicos (**Tabela VIII e Fig. 11a**).

Em relação ao bio-óleo bruto, foram tentativamente identificados 445 compostos. Todas as classes químicas de compostos observadas nas frações estavam presentes no bio-óleo bruto. Entretanto, as principais classes identificadas foram cetonas, hidrocarbonetos e fenóis. O bio-óleo bruto apresentou uma maior quantidade de açúcares quando comparado com as frações obtidas no fracionamento e também à presença de aminas, que não foram observadas nas cinco frações que foram analisadas por GCxGC/TOFMS (**Tabela VIII e Fig. 11a**).

Com relação à área percentual dos compostos tentativamente identificados nas frações obtidas com o fracionamento, na BO SE F1, em torno de 87,5% dos picos identificados como hidrocarbonetos correspondem a 91,7% em área percentual identificada nesta fração. Na BO SE F2 e BO SE F3, os hidrocarbonetos correspondem a 85,6% e 24,4%, respectivamente, em área identificada nestas frações. Enquanto, na fração BO SE

F4 os principais compostos identificados foram cetona e fenóis que correspondem à área percentual em torno de 13,2% e 59,4%, respectivamente. Da mesma forma, na fração BO SE F5, cetonas e fenóis foram os majoritários e correspondem a 22,8% e 54,5%, respectivamente. Cabe ressaltar que a fração BO SE F5 apresentou maior número de cetonas do que fenóis, entretanto a área percentual de fenóis é cerca de duas vezes maior do que a de cetonas (**Tabela VIII e Fig. 11b**). Na BO SE F3 o maior número de picos tentativamente identificados de hidrocarbonetos também não corresponde a maior área percentual, neste caso, as cetonas possuem a maior área percentual identificada. Nas demais frações o maior número de picos identificados correspondem ao maior percentual em área identificada.

No bio-óleo bruto, em torno de 35,0% da área percentual dos compostos tentativamente identificados correspondem a fenóis, em torno de 23,1% a cetonas e em torno de 12,0% a hidrocarbonetos. Assim como observado nas frações BO SE F3 e BO SE F5, os compostos presentes em maior número no bio-óleo (cetonas e hidrocarbonetos) não correspondem a maior área percentual (**Tabela VIII e Fig. 11**).

Tabela VIII: Número de picos tentativamente identificados, percentual de picos e percentual em área para o bio-óleo de serragem e para as suas frações obtidas pelo fracionamento PLC-6, analisados por GCxGC/TOFMS.

Classes	BO SE			BO SE F1			BO SE F2			BO SE F3			BO SE F4			BO SE F5		
	P	P%	A%	P	P%	A%	P	P%	A%	P	P%	A%	P	P%	A%	P	P%	A%
Ácidos	19	4,28	1,54	nd	Nd	nd	nd	nd	Nd	nd	nd	nd	3	0,96	1,16	23	6,07	3,04
Álcoois	9	2,03	0,51	nd	Nd	nd	nd	nd	Nd	10	7,69	3,20	6	1,93	0,40	6	1,60	0,67
Aldeídos	49	11,04	17,93	12	3,07	1,98	14	4,40	2,49	14	10,77	10,93	40	12,86	9,20	51	13,46	9,81
Cetonas	122	27,25	23,06	17	4,35	2,88	14	4,40	2,85	32	24,62	34,67	92	29,58	13,23	147	38,79	22,84
Ésteres	12	2,70	2,09	nd	Nd	nd	nd	nd	Nd	nd	nd	nd	nd	nd	nd	2	0,53	1,46
Éteres	51	11,49	6,17	14	3,58	2,96	34	10,69	8,11	14	10,77	6,32	40	12,86	9,64	37	9,76	3,83
Fenóis	74	16,67	35,00	6	1,53	0,55	7	2,20	1,00	14	10,77	20,44	97	31,19	59,40	93	24,54	54,49
Hidrocarbonetos	100	22,52	11,97	342	87,47	91,67	249	78,30	85,55	46	35,38	24,44	33	10,61	6,98	19	5,01	3,84
Açúcares	3	0,68	0,22	nd	Nd	nd	nd	nd	Nd	nd	nd	nd	nd	nd	nd	1	0,23	0,02
Nitrogenados	6	1,35	1,50	nd	Nd	nd	nd	nd	Nd	nd	nd	nd	nd	nd	nd	nd	nd	nd
Total	445	100	100	391	100	100	318	100	100	130	100	100	311	100	100	379	100	100

P = número de picos tentativamente identificados; P% percentual de picos em cada classe; A% percentual de área em cada classe; nd não detectado.

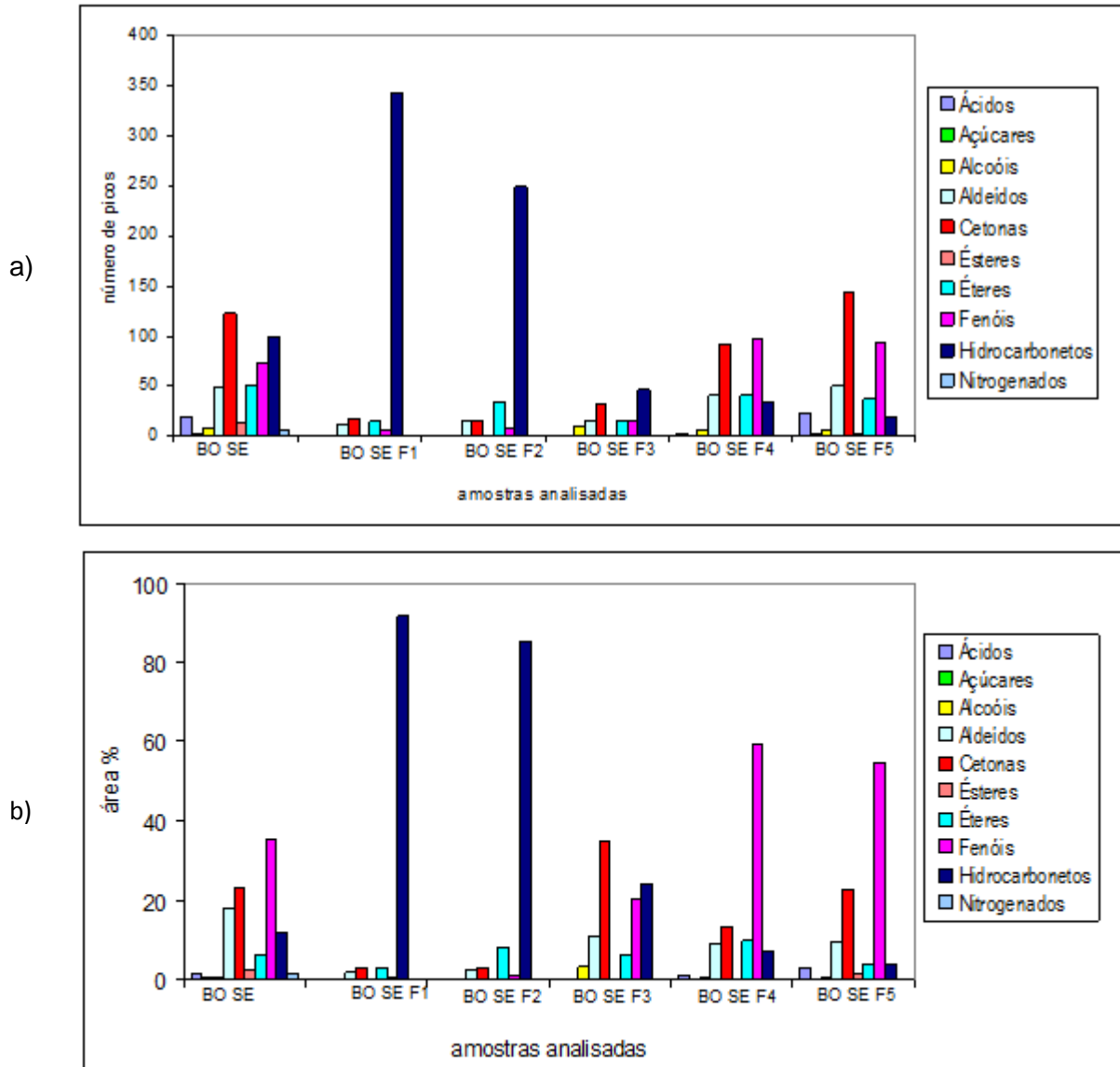


Figura 11: Distribuição número de compostos identificados e as suas respectivas áreas percentuais para o bio-óleo de serragem e para as suas frações obtidas com o fracionamento, através da análise por GCxGC/TOFMS. **a)** Distribuição do número de compostos tentativamente identificados. **b)** Distribuição das áreas percentuais por classe de compostos tentativamente identificados.

4.2.1.2 Detalhamento das principais classes de compostos no bio-óleo bruto de serragem e nas suas frações obtidas com o fracionamento

A distribuição dos compostos presentes no bio-óleo em estudo no espaço bidimensional possibilita uma classificação dos compostos por classe o que facilita a identificação dos mesmos, uma vez que apresenta uma distribuição regular no espaço bidimensional que é impossível de visualizar no diagrama de cores original (**Fig. 10**). Assim, foi usado o programa *Microsoft Excel™*, com a finalidade de construir os gráficos de dispersão, contendo os valores de tempo de retenção na primeira e na segunda dimensão

para cada classe química de compostos tentativamente identificados e também para as principais subclasses observadas no bio-óleo e nas suas frações, conforme pode ser visualizado nas **Figuras 12 a 17**. Para melhorar a visualização da distribuição estrutural dos compostos de acordo com o número de carbonos na cadeia, os compostos cujo tempo de retenção na 2D excederam o período de modulação, ou seja, estavam fora de ciclo (*wrap-around*),¹⁸⁵ foram corrigidos adicionando o período de modulação ao tempo da 2D . Isto facilita a identificação da correlação espacial entre compostos de mesma “família”.

O grande poder de separação da técnica GC×GC/TOFMS também pode ser melhor visualizado nesses gráficos de dispersão, pois se observam coeluições de vários compostos na primeira dimensão, sendo possível a identificação dos mesmos devido à presença da segunda dimensão. Isso permite uma identificação mais minuciosa dos compostos presentes tanto em altas quanto em baixas concentrações na amostra.

Na **Figura 12** tem-se a distribuição espacial de todas as classes dos compostos presentes no bio-óleo bruto de serragem (**Fig. 12a**) e também das principais subclasses das cetonas (**Fig. 12b**). A complexidade do bio-óleo bruto pode ser visualizada no gráfico de dispersão apresentado na **Figura 12a**, onde observa-se várias coeluições, principalmente, cetonas, aldeídos, éteres e fenóis. As coeluições das cetonas e dos aldeídos podem ser atribuídas, principalmente, em virtude das similaridades entre as estruturas. Em relação às principais subclasses das cetonas, observa-se uma boa separação entre as hidroxí indenona, indanona, furanona, benzofuranona, dihidropiranonas e cetonas com o radical furanil (**Fig. 12b**), onde os compostos referentes a cada subclasse estão separados e distribuídos de acordo com o peso molecular e com o número de carbonos da cadeia carbônica.

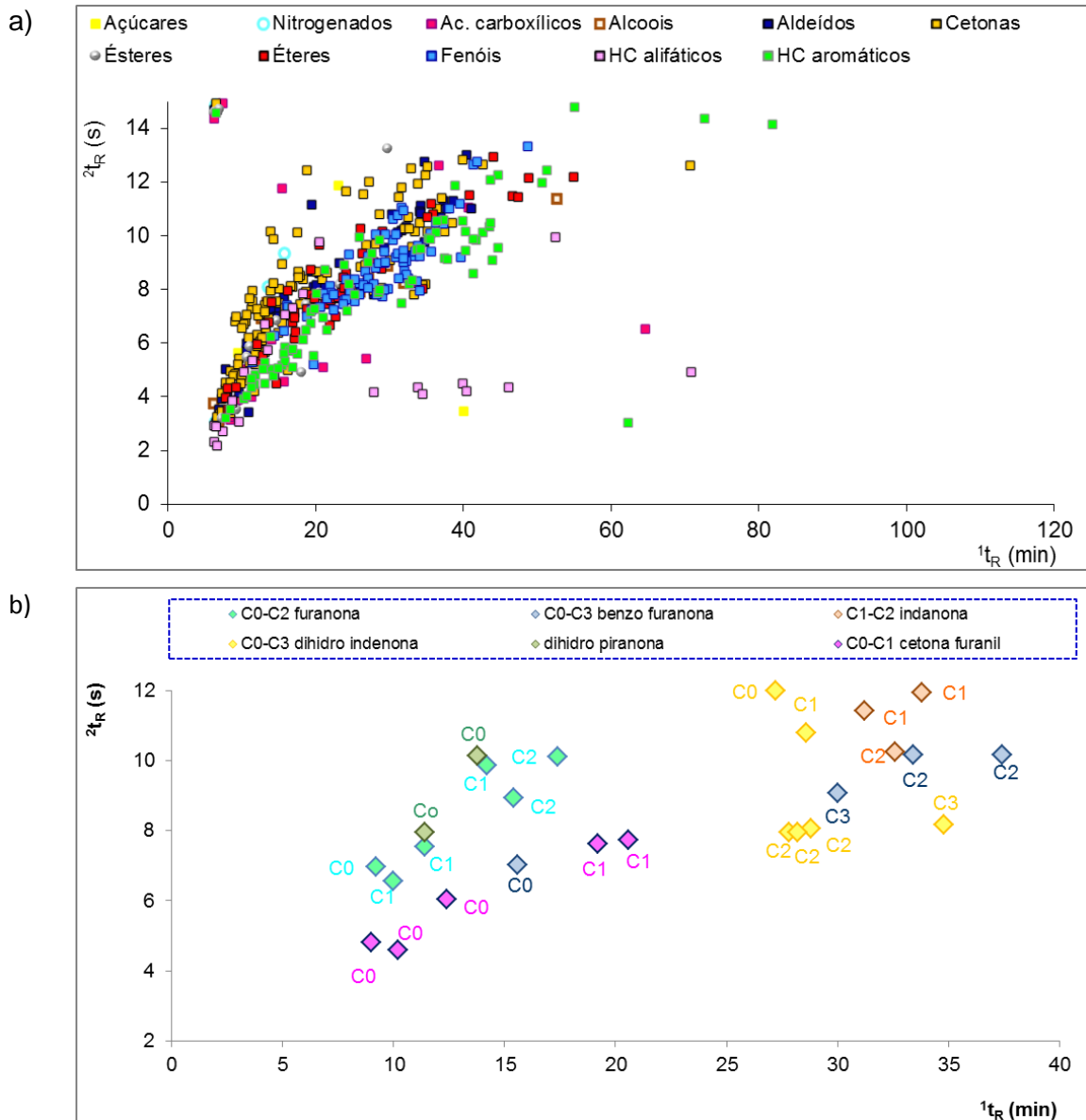
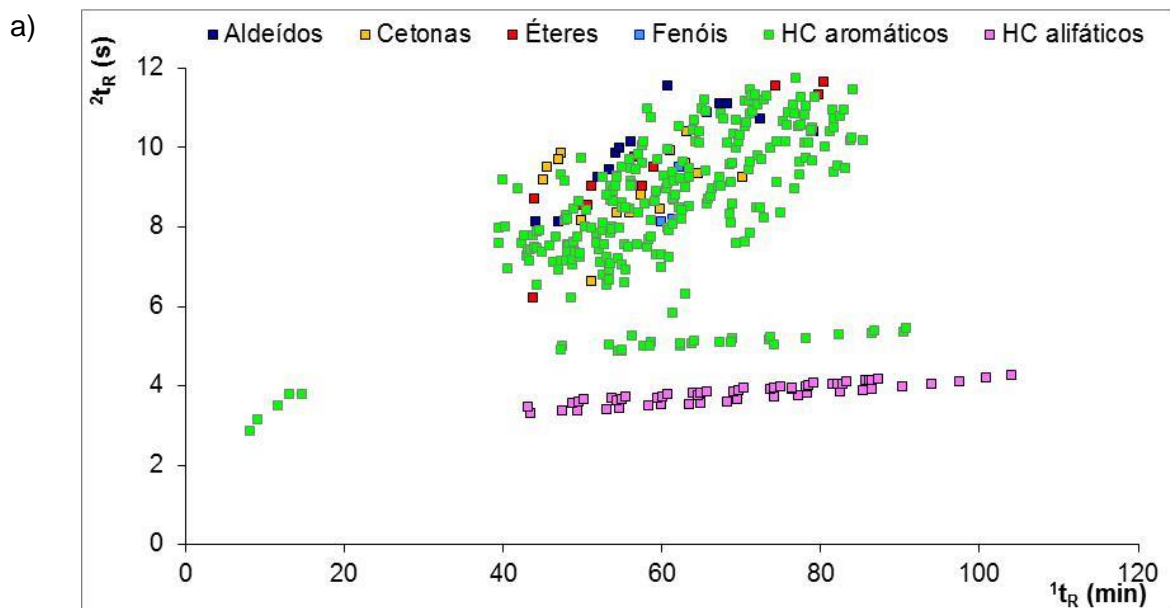


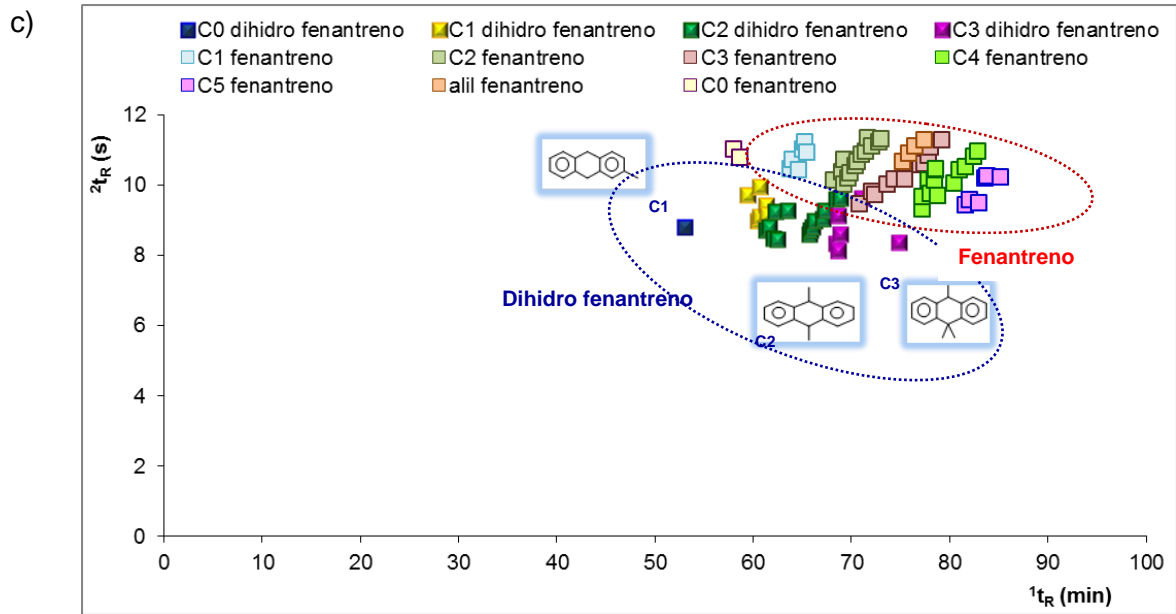
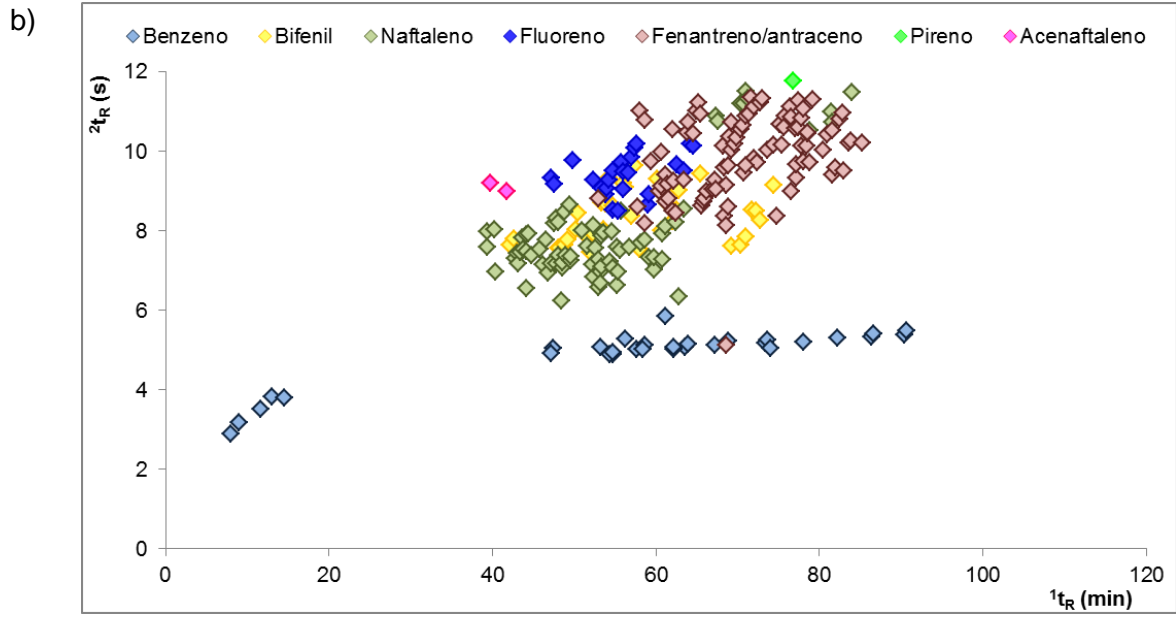
Figura 12: Gráficos de dispersão para as classes de compostos tentativamente identificadas no bio-óleo bruto de serragem e para as principais subclasses das cetonas e demais classes de compostos tentativamente identificados no **bio-óleo bruto** de serragem por GCxGC/TOFMS. a) **todos os compostos**; b) **furanonas, indenonas, piranonas**.

A **Figura 13** apresenta a distribuição espacial dos compostos da fração BO SE F1 e também as principais subclasses observadas para a principal classe de compostos identificada nesta fração, os hidrocarbonetos. Observa-se no gráfico de dispersão para a fração BO SE F1 (**Fig. 13a**) uma nítida separação entre os hidrocarbonetos aromáticos e os alifáticos. Sendo que, os hidrocarbonetos alifáticos ocupam o espaço bidimensional na região de menores tempos de retenção na 2D , em virtude da menor polaridade destes compostos quando comparados com os hidrocarbonetos aromáticos. As demais classes químicas observadas para esta fração foram cetonas, aldeídos, ésteres e fenóis, entretanto, em pequena quantidade e numa região de maiores tempo de retenção na 2D .

Os hidrocarbonetos aromáticos apresentaram uma separação estruturada entre as subclasses presentes (**Fig. 13b**). Observa-se uma boa separação entre as subclasses dos hidrocarbonetos aromáticos (acenaftaleno, naftaleno, fluoreno, pireno, antraceno/fenantreno). Somente os compostos pertencentes à subclasse bifenila, não saíram em uma região particular, ou seja, esses compostos coeluíram com os naftalenos, fluoreno e antraceno/fenantreno. É possível observar na **Figura 13c** que entre os compostos pertencentes à subclasse antraceno/fenantreno, observa-se uma separação de acordo com o número de carbonos dos radicais ligados a cadeia principal. De acordo com este gráfico de dispersão, observa-se também que ocorreu uma boa separação entre os compostos pertencentes à subclasse antraceno/fenantreno e os compostos pertencentes à subclasse dihidro fenantreno/antraceno (**Fig. 13c**). Esta última, formada a partir da redução do antraceno/fenantreno. Os compostos pertencentes à subclasse naftaleno também apresentaram uma separação de acordo com o número de carbonos dos radicais ligados a cadeia carbônica principal (**Fig. 13d**).



Continua...



continua

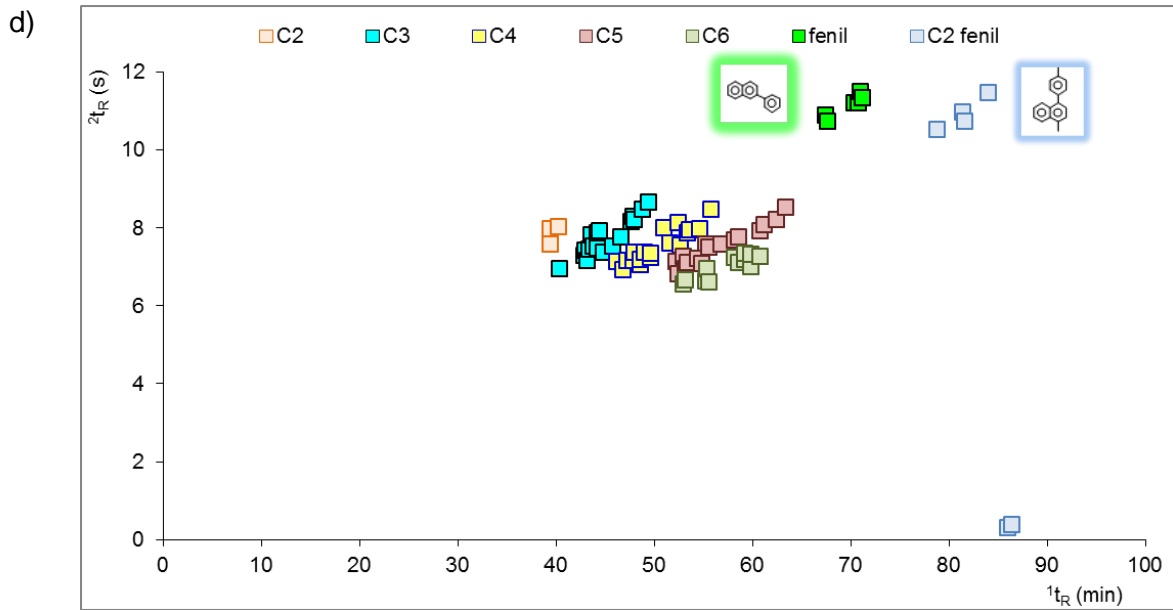


Figura 13: Gráficos de dispersão para as principais subclasses hidrocarbonetos aromáticos e demais classes de compostos identificados na fração **BO SE F1** do bio-óleo de serragem por GC×GC/TOFMS. a) **todos os compostos**; b) **hidrocarbonetos aromáticos**; c) **fenantrenos e antracenos**; d) **naftalenos**.

A **Figura 14** apresenta os gráficos de dispersão para os compostos tentativamente identificados na fração BO SE F2 e para as principais subclasses observadas para os hidrocarbonetos. O perfil da distribuição espacial dos compostos identificados na fração BO SE F2 foi muito parecido com a distribuição observada para a fração BO SE F1. Sendo que em ambas as frações foram observadas as mesmas classes de compostos (**Fig. 14a**) e a mesma separação entre as subclasses dos hidrocarbonetos, inclusive para os compostos pertencentes à subclasse bifenila (**Fig. 14b**). Entretanto, na fração BO SE F2 observou-se a presença da subclasse indeno e fluoranteno que não foram identificados na fração BO SE F1 (**Fig. 14b**). Os compostos das subclasses dihidro fenantreno/antraceno e fenantreno/antraceno também apresentaram o mesmo perfil de separação observado para a fração BO SE F1 (**Fig. 14c**).

A separação dos compostos presentes no bio-óleo por classes químicas apresenta grande importância para indústria, uma vez que, as diferentes classes de compostos apresentam diferenciadas aplicações. Neste sentido, as frações BO SE F1 e BO SE F2 apresentam, praticamente, hidrocarbonetos, estes poderiam ser isolados do bio-óleo e serem utilizados como fonte de biocombustíveis.

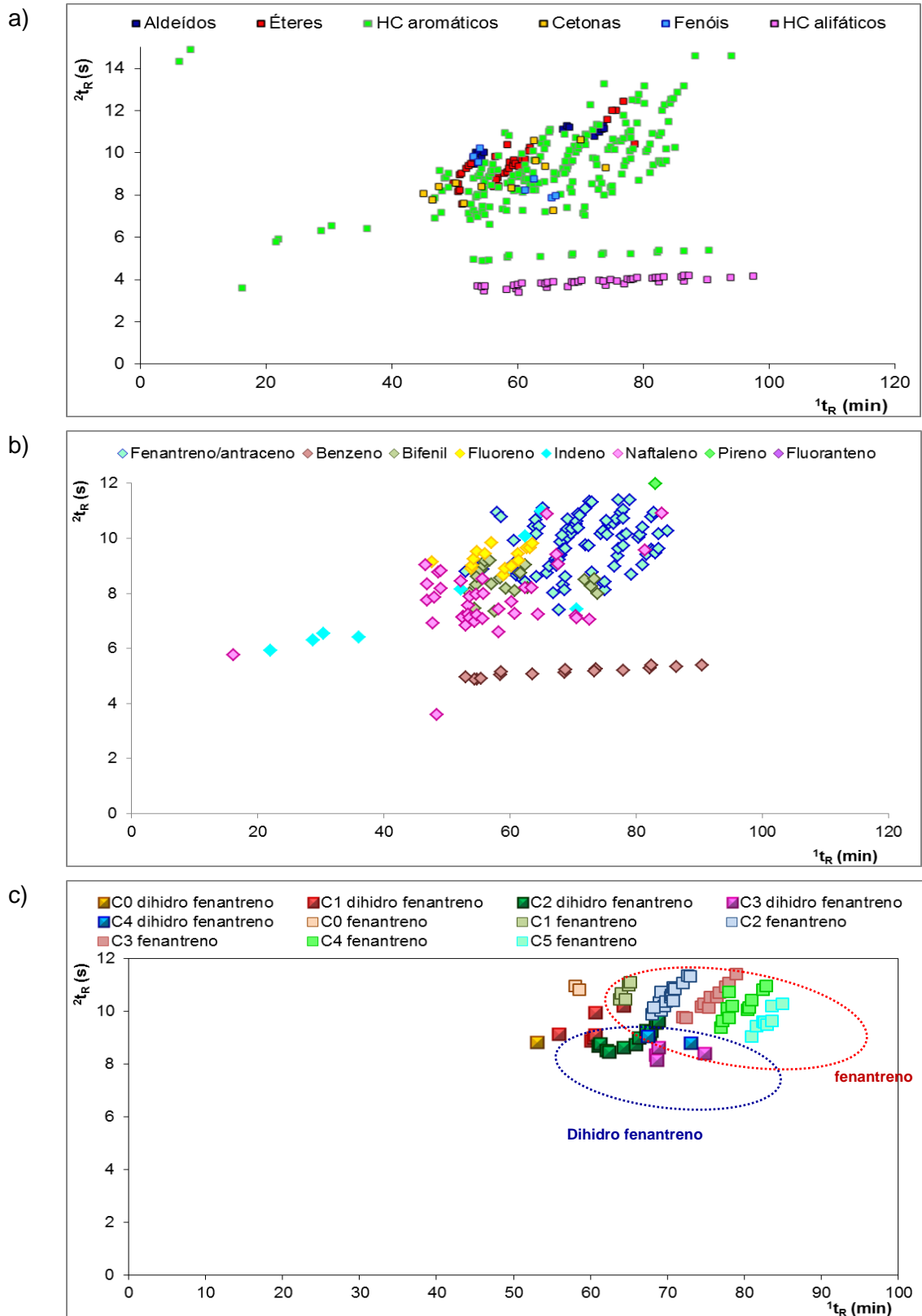
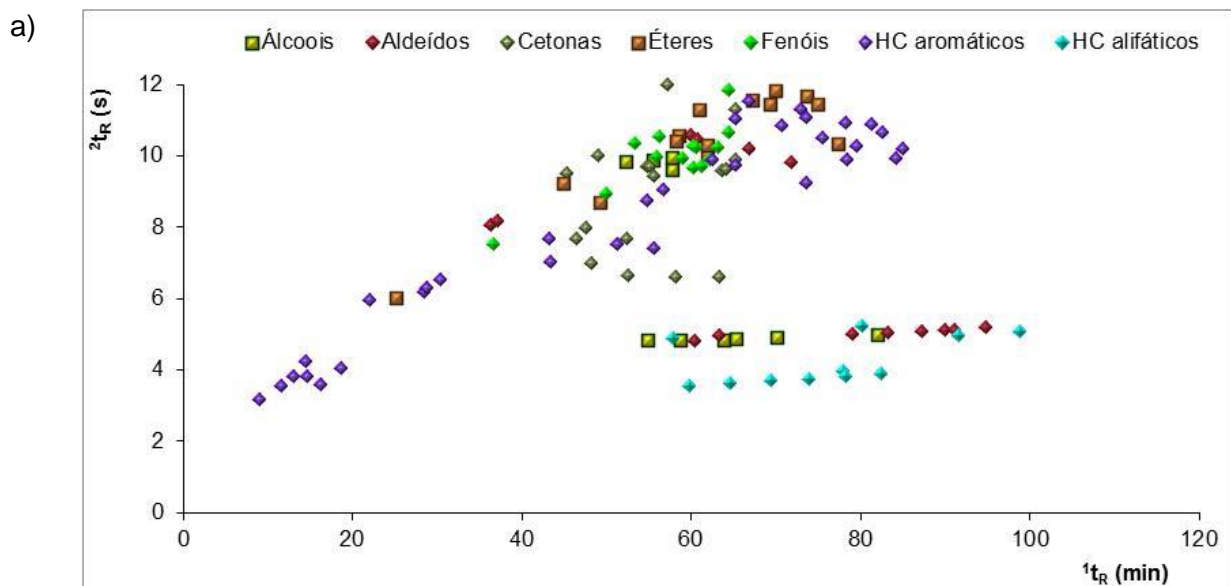


Figura 14: Gráficos de dispersão para as principais subclasses de hidrocarbonetos aromáticos e demais classes de compostos tentativamente identificados na fração **BO SE F2** do bio-óleo de serragem por GCxGC/TOFMS. a) **todos os compostos**; b) **hidrocarbonetos aromáticos**; c) **fenantrenos e antracenos**.

De acordo com o gráfico de dispersão das classes dos compostos tentativamente identificados na fração BO SE F3, observa-se uma boa separação entre os hidrocarbonetos aromáticos e os alifáticos (**Fig. 15a e b**). Os fenóis e os álcoois aromáticos coeluíram, ou seja, saíram na mesma região no diagrama, provavelmente, em função das suas semelhanças estruturais, e as cetonas e os aldeídos encontram-se espalhados por várias regiões (**Fig. 15a**). Os éteres, embora todos aromáticos, possuem tempos de retenção entre 40 e 80 minutos na ¹D. Isso pode ser em virtude das diferentes estruturas aromáticas identificadas para esta classe. O mesmo pode ser observado para os hidrocarbonetos aromáticos, que estão distribuídos por todo o diagrama. A grande variedade de subclasses para os hidrocarbonetos pode ser visualizada na **Figura 15b**. Nesta figura, verifica-se também uma separação estruturada das subclasses dos hidrocarbonetos aromáticos, além de uma separação entre os hidrocarbonetos alifáticos insaturados e saturados, sendo que os hidrocarbonetos saturados apresentaram menor interação com a coluna ²D, pois apresentam menor polaridade em virtude da ausência de insaturações. Em relação às cetonas, segunda classe com maior número de compostos nesta fração, também se observa grande aromaticidade entre as suas subclasses, entretanto, a separação entre essas subclasses é pequena, em função da similaridade entre estas (**Fig. 15c**).



Continua...

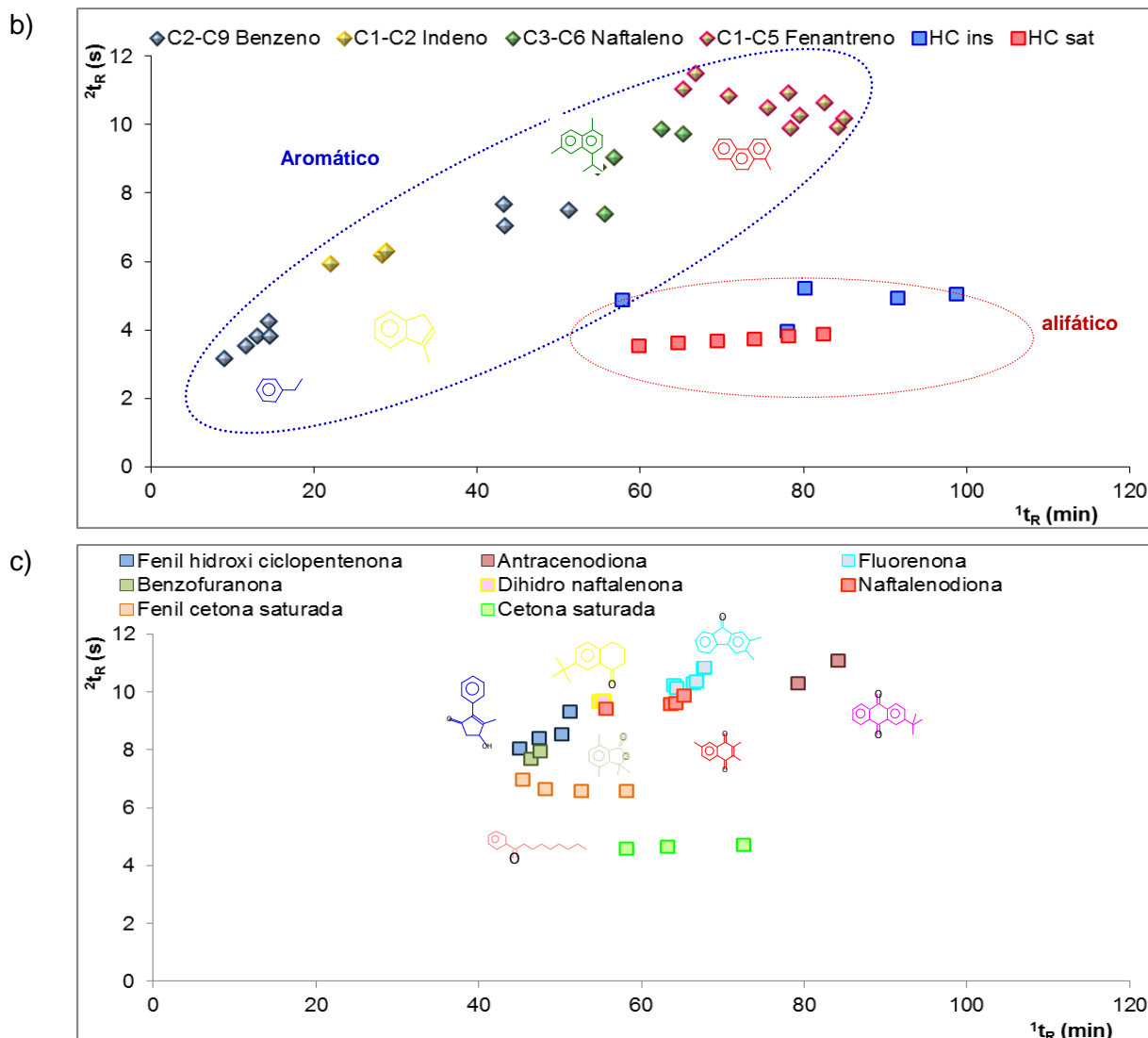
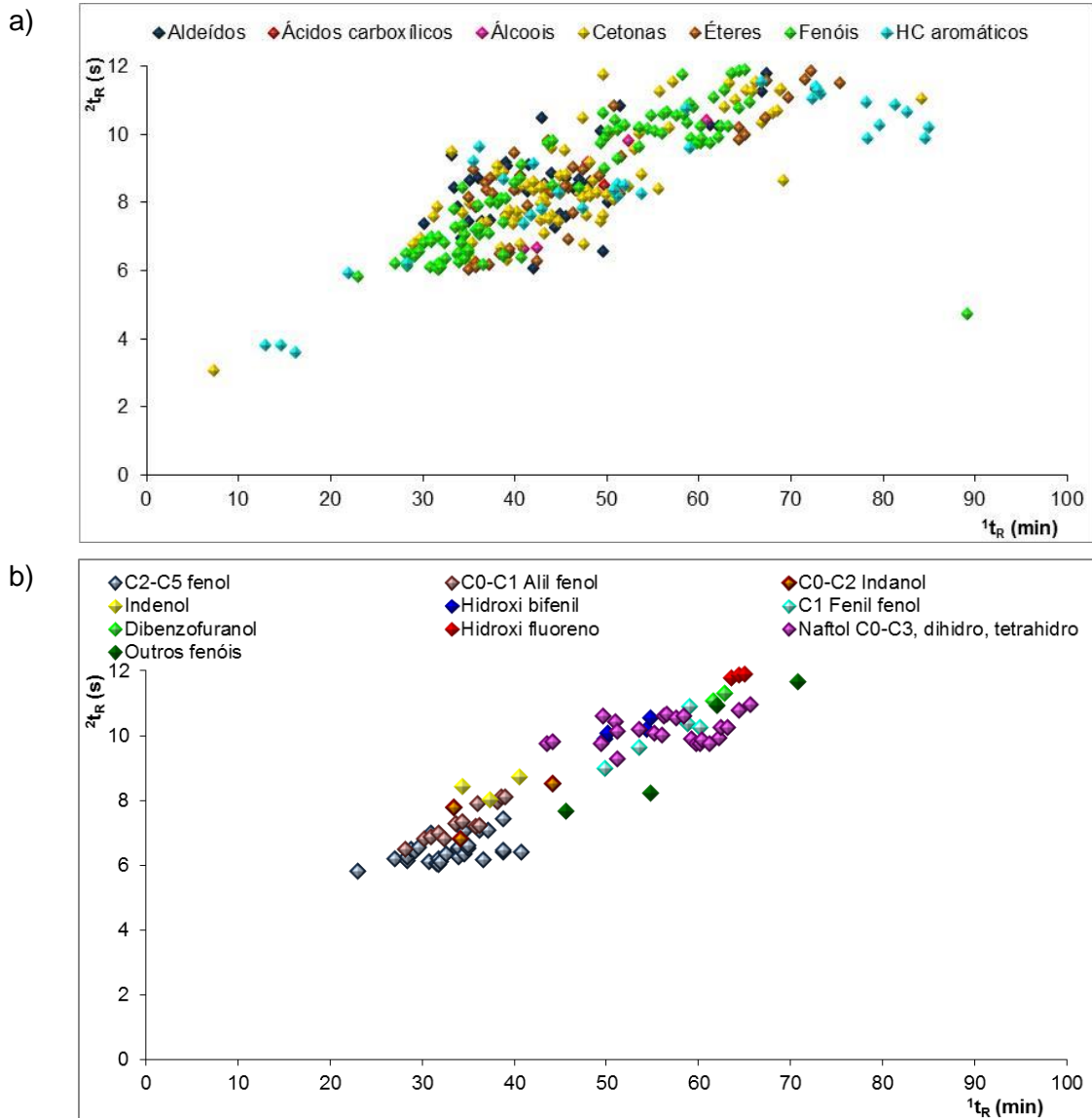


Figura 15: Gráficos de dispersão para as principais subclasses dos hidrocarbonetos e das cetonas e demais classes de compostos tentativamente identificados na fração **BO SE F3** do bio-óleo de serragem por GCxGC/TOFMS. a) **todos os compostos**; b) **hidrocarbonetos**; c) **cetonas**.

A **Figura 16** apresenta o gráfico de dispersão das funções químicas presentes na fração BO SE F4, assim como as principais subclasses dos fenóis. Nesta fração observam-se as seguintes classes químicas: aldeídos, ácidos carboxílico, álcoois, cetonas, éteres, fenóis e hidrocarbonetos aromáticos. Os fenóis estão presentes em maior quantidade e espalhados por todo o diagrama (**Fig. 16a**). O perfil de dispersão das classes químicas desta fração é diferente do observado para as duas primeiras frações. Isto ocorre em virtude da grande diferença dos tipos e quantidade dos compostos tentativamente identificados, ou seja, nas primeiras frações observam-se, praticamente, hidrocarbonetos e estes foram observados, principalmente, entre 40 e 100 minutos na 1^{D} , enquanto na fração BO SE F4, foi visualizada uma pequena quantidade de hidrocarbonetos e uma grande quantidade de compostos com características mais polares cujos tempos de retenção na primeira dimensão foram, principalmente, entre 30 e 90 minutos. Foram tentativamente identificadas

nove principais subclasses de fenóis nesta fração com uma boa separação entre estas, conforme **Figura 16b** e **16c**. Na **Figura 16c**, tem-se a distribuição espacial para a subclasse de fenóis que apresentam radicais alquil e alil. Sendo possível visualizar uma clara separação de acordo com o número de carbonos dos radicais ligados a cadeia.



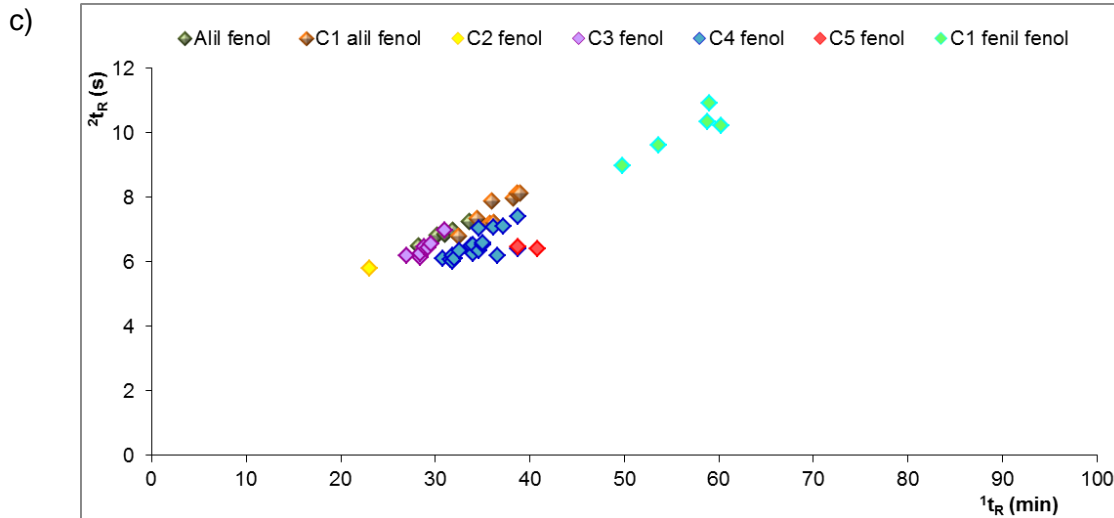


Figura 16: Gráficos de dispersão para as principais subclasses dos fenóis e demais classes de compostos tentativamente identificados na fração **BO SE F4** do bio-óleo de serragem por GCxGC/TOFMS. a) **todos os compostos**; b) **todos os fenóis**; c) **alquil, alil e fenil fenóis**.

A **Figura 17** apresenta o gráfico de dispersão para as funções químicas identificadas na fração BO SE F5 e para algumas subclasses das cetonas. As principais classes químicas observadas nesta fração foram cetonas e fenóis (**Fig. 17a**). Os fenóis não estão isolados em uma região específica, mas estão distribuídos, principalmente, numa região entre 15 e 50 minutos na 1D e entre 5 e 10 segundos na 2D . As cetonas e os aldeídos encontram-se distribuídos por todo o diagrama (**Fig. 17a**). Apesar das cetonas estarem espalhadas pelo diagrama, foi possível observar a estruturação de algumas subclasses (**Fig. 17b e c**), onde na **Figura 17b** observa-se a separação das indanonas de acordo com o número de carbonos do radical alquila ligado na cadeia principal (indanonas C0-C3) e também em relação à ligação da hidroxila e do radical fenila ligados à cadeia principal. Enquanto na **Figura 17c** observa-se a separação da subclasse acetofenona. O perfil do gráfico de dispersão para os compostos tentativamente identificados nesta fração foi muito similar ao observado para a fração BO SE F4.

A presença de uma grande quantidade de fenóis e cetonas nas frações BO SE F4 e BO SE F5 evidenciam o uso destas frações como fonte destes compostos pela indústria química. Por exemplo, os fenóis separados nestas frações poderiam ser utilizados como matéria-prima para a produção de resinas fenólicas, sendo uma alternativa para substituir a produção de fenóis a partir de fontes de petróleo.¹⁸⁶ As cetonas presentes em grande quantidade nestas duas frações, poderiam ser utilizadas na síntese química, uma vez que, compostos como furanonas são utilizados como agentes inibidores da germinação de sementes.¹⁸⁷

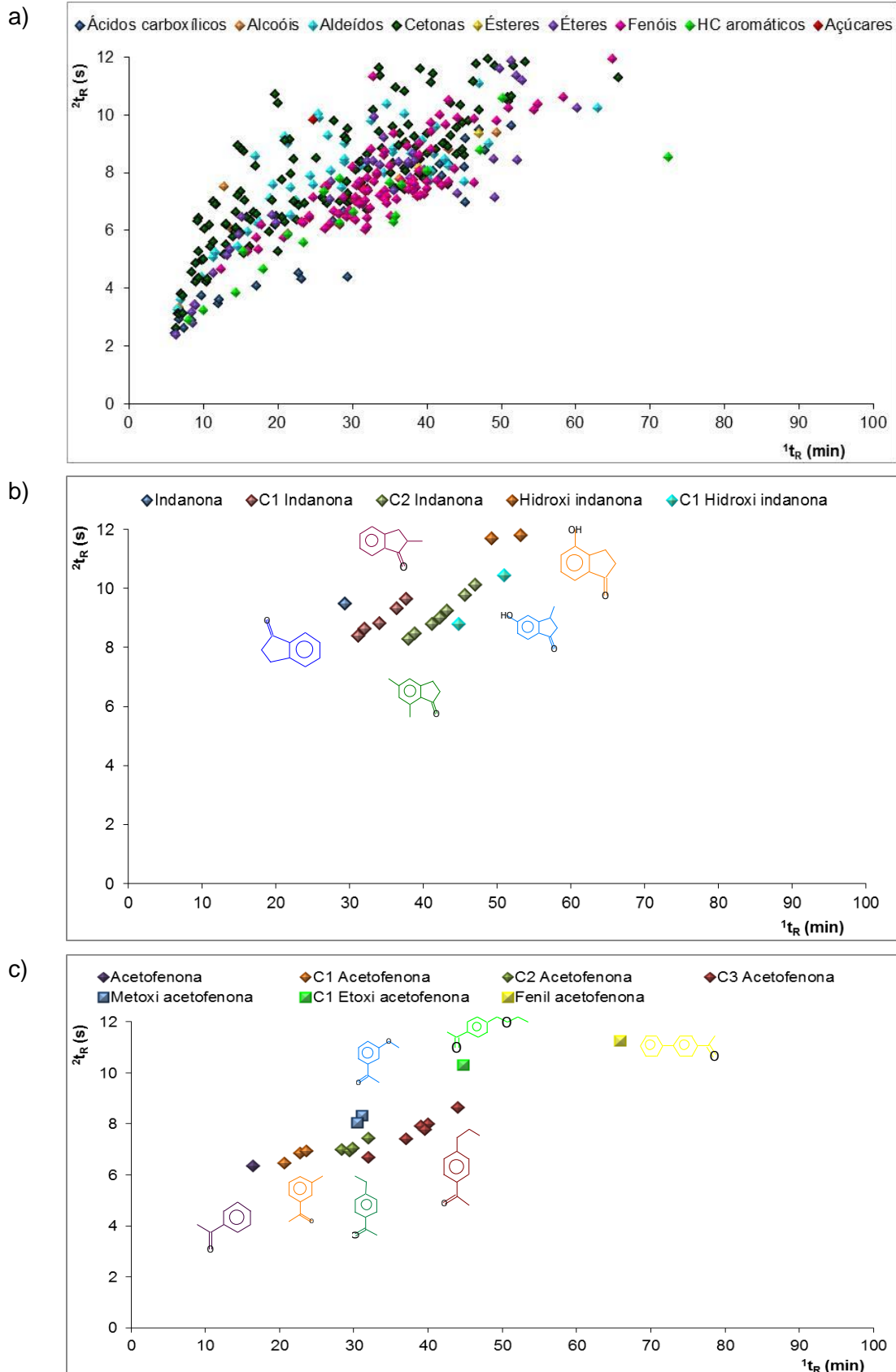


Figura 17: Gráficos de dispersão para as algumas subclasses das cetonas e demais classes de compostos tentativamente identificados na fração **BO SE F5** do bio-óleo de serragem por GCxGC/TOFMS. a) **todos os compostos**; b) **cetonas**: indanonas; Indanona, C1 Indanona, C2 Indanona, hidroxi Indanona, C1 hidroxi Indanona; c) **cetonas**: acetofenonas.

4.2.1.3 Análise semiquantitativa dos compostos majoritários na amostra de bio-óleo de serragem e suas frações

Foi realizada uma análise semiquantitativa dos compostos majoritários presentes no bio-óleo e nas suas frações obtidas com o fracionamento, ou seja, compostos com área percentual maior que 1,0%. Estes dados podem ser visualizados nas seguintes figuras: **Figura 18** (bio-óleo bruto), **Figura 19** (fração BO SE F1), **Figura 20** (fração BO SE F2), **Figura 21** (fração BO SE F3), **Figura 22** (fração BO SE F4), **Figura 23** (fração BO SE F5).

Em relação ao bio-óleo bruto foram tentativamente identificados 22 compostos com área percentual maior que 1,0% pertencentes às seguintes classes químicas: aldeídos, cetonas, fenóis e hidrocarbonetos alifáticos e aromáticos. A soma das áreas percentuais destes compostos corresponde a 53,6%. Sendo os compostos com maiores áreas percentuais referentes a aldeídos (2 isômeros do C1 furano carboxaldeído, em torno de 7,0%) e fenóis (2 isômeros C1 fenol, em torno de 8,0%; 2 isômeros C2 fenol, em torno de 4,0% e o benzenodiol, em torno de 4,0%), conforme **Figura 18**.

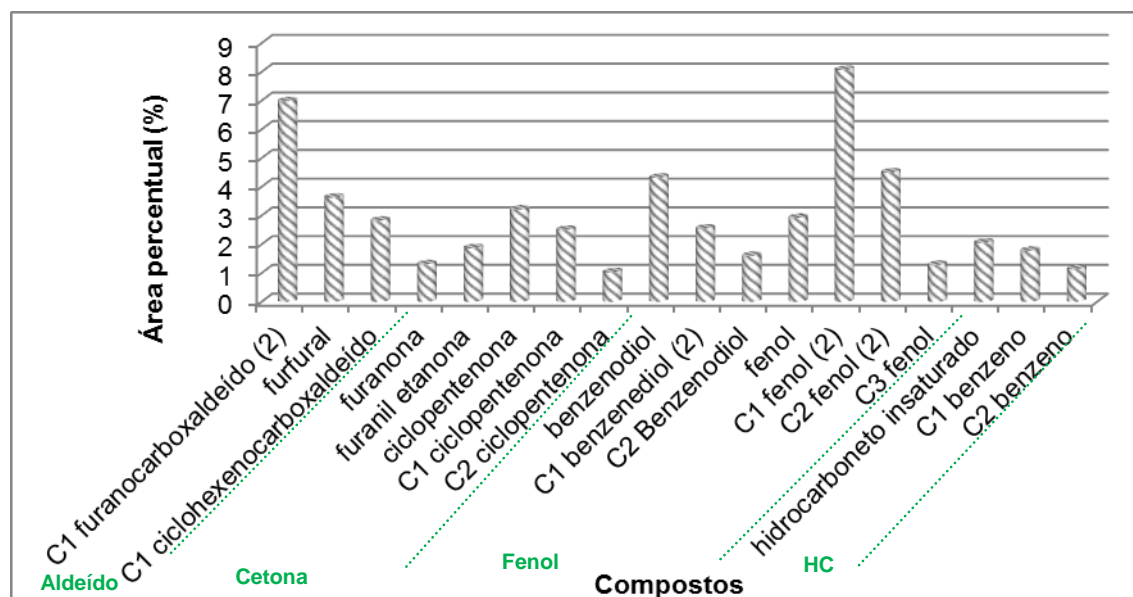


Figura 18: Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (> 1,0 % em área) no bio-óleo bruto obtido da serragem analisado por GC×GC/TOFMS. O número entre parênteses representa o número de isômeros.

Na fração BO SE F1 foram tentativamente identificados 19 compostos com área percentual maior que 1,0 %, sendo estes pertencentes às classes químicas: éteres, cetonas e hidrocarbonetos alifáticos e aromáticos, conforme **Figura 19**. A soma das áreas percentuais destes compostos foi igual a 45,0%. Destes 19 compostos, 16 correspondem a hidrocarbonetos aromáticos, sendo a soma das áreas destes compostos de 41,1%. Os seis compostos majoritários também correspondem a hidrocarbonetos (4 isômeros C4

fenantreno cuja soma das áreas corresponde a 20,1 %, C1 fenantreno 3,4 %, C5 naftaleno 2,9 % e fenantreno 2,1 %).

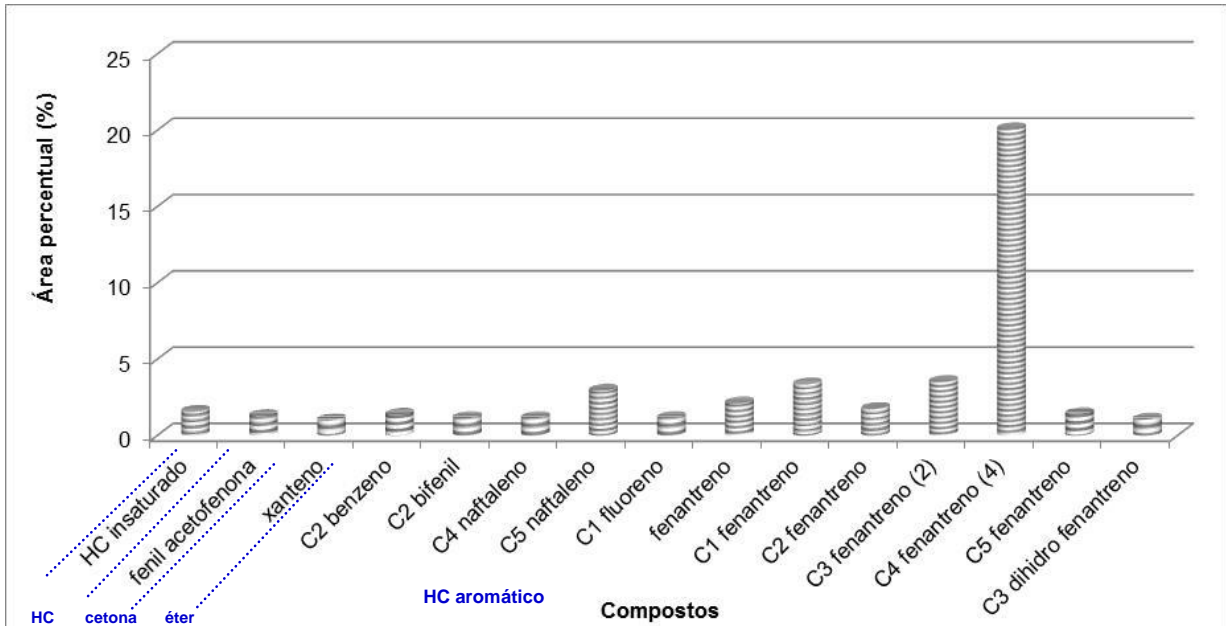


Figura 19: Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (> 1,0% em área) na fração BO SE F1 obtida com o fracionamento do bio-óleo de serragem analisado por GCxGC/TOFMS. O número entre parênteses representa o número de isômeros.

Na fração BO SE F2 (**Fig. 20**) foi observada a presença de 15 compostos com área percentual maior que 1,0% pertencentes às classes químicas: éteres, cetonas e hidrocarbonetos alifáticos e aromáticos. A soma das áreas percentuais destes compostos foi de 51,6%. Assim como observado na BO SE F1, a maioria dos compostos majoritários corresponde a hidrocarbonetos aromáticos. Dos 15 compostos majoritários, 12 correspondem a hidrocarbonetos cuja soma das áreas destes compostos igual a 49,2%. Sendo os compostos majoritários o C4 fenantreno com área percentual igual a 28,7 %, seguido do C1 fenantreno (2 isômeros) com 4,4 %, do C2 fenantreno com 3,9% (2 isômeros) e do C3 fenantreno (2 isômeros) com 3,5%.

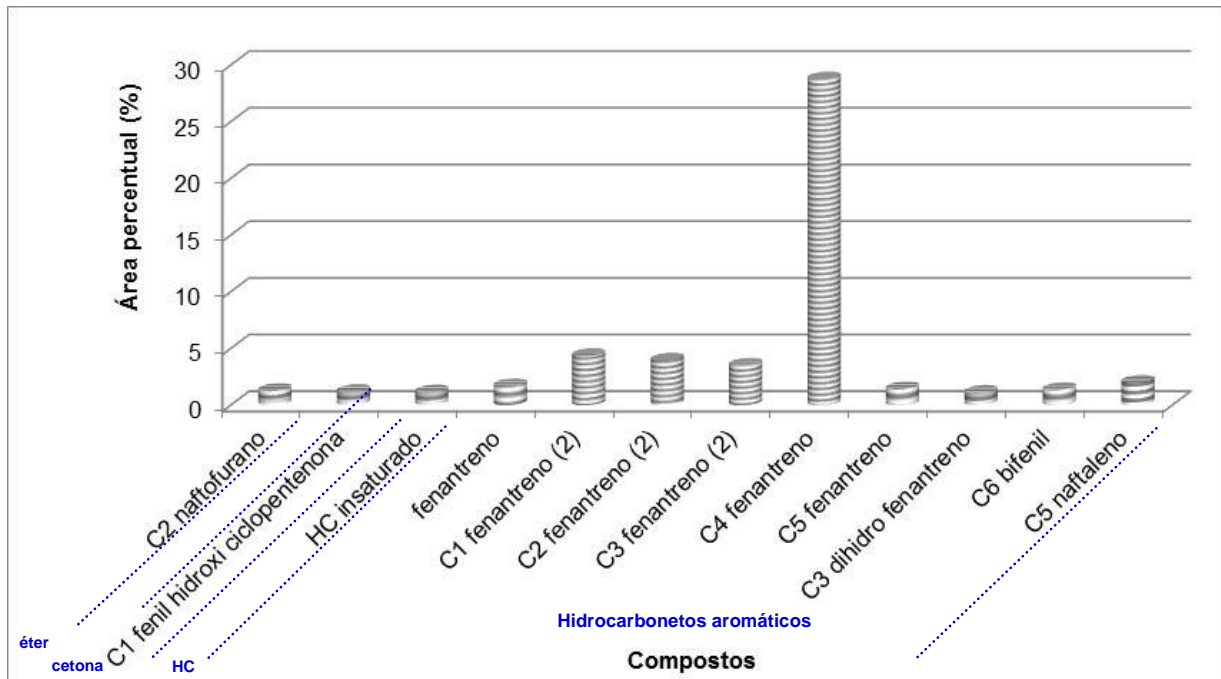


Figura 20: Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (> 1,0% em área) na fração BO SE F2 obtida com o fracionamento do bio-óleo de serragem analisado por GCxGC/TOFMS. O número entre parênteses representa o número de isômeros.

Os compostos com área percentual maior que 1,0 % na fração BO SE F3 correspondem a álcoois, aldeídos, cetonas, éteres, fenóis e hidrocarbonetos, conforme **Figura 21**. Foram identificados 23 compostos com área maior que 1,0% cuja soma das respectivas áreas correspondem a 73,6%. Os majoritários pertencem à classe cetona (C1 fenil hidroxi ciclopentenona considerando 2 isômeros, 10,9 % e C4 antracenodiona considerando 2 isômeros, 9,2 %), hidrocarboneto (C2 benzeno, 5,6 % e C5 fenantreno, 5,3 %) e fenol (C2 naftol considerando 2 isômeros, 8,8 % e C3 naftol considerando 3 isômeros).

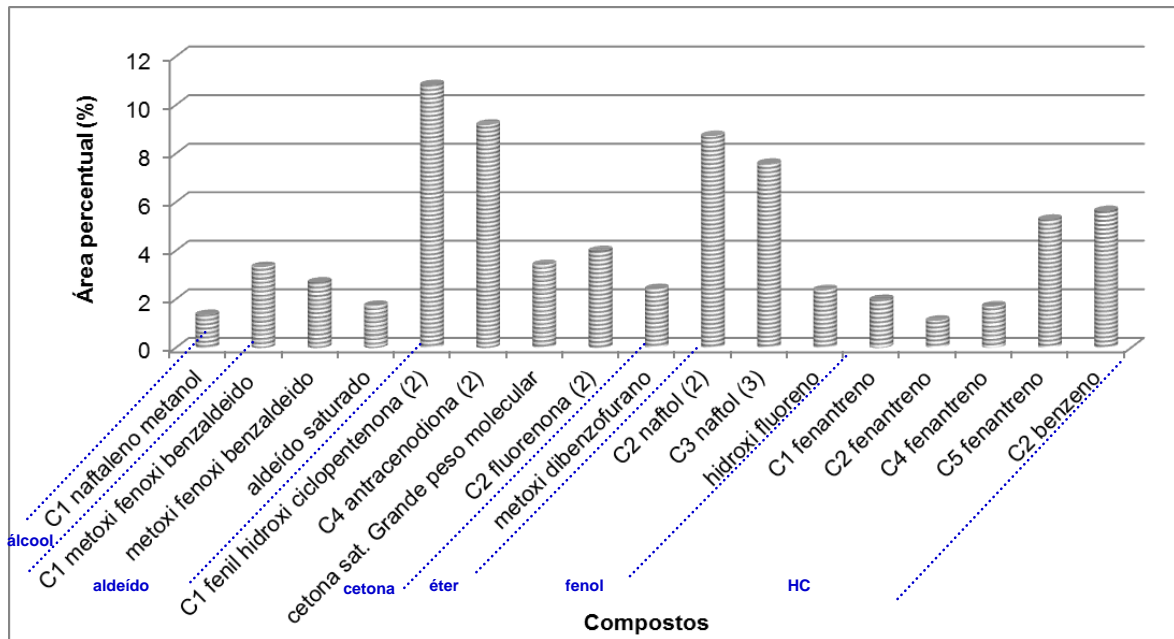


Figura 21: Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (> 1,0% em área) na fração BO SE F3 obtida com o fracionamento do bio-óleo de serragem analisado por GC×GC/TOFMS. O número entre parênteses representa o número de isômeros.

Na fração BO SE F4 (**Figura 22**) foram observados 21 compostos com áreas percentuais maiores que 1,0 %, sendo que a soma destas áreas corresponde a 50,6%. Esses compostos pertencem as seguintes classes químicas: aldeídos, cetonas, éteres, fenóis e hidrocarbonetos. Destaque para os fenóis cuja soma das áreas percentuais foi de 40,6%. Entre os compostos majoritários, destaca-se a presença dos fenóis: 2 isômeros C1 naftol, 11,6%, 4 isômeros C1 alil fenol, 13,8% e 3 isômeros C2 naftol, 6,0%. Embora observado a presença de hidrocarbonetos entre os compostos com área percentual maior que 1,0% nesta fração, a soma da área destes compostos corresponde a somente 2,6%.

Os 22 compostos majoritários observados na fração BO SE F5 correspondem a ácidos, aldeídos, ésteres, éteres, cetonas, hidrocarbonetos e fenóis, **Figura 23**. A soma das áreas percentuais destes compostos corresponde a 55,2%. Entretanto, 39,9% desta área correspondem a fenóis e 4,8% correspondem a cetonas. Nesta fração, os fenóis também se destacam entre os compostos com maior área percentual: benzenodiol, 8,3%; 3 isômeros C1 benzenodiol, 10,3%; C1 fenol, 6,2% e 2 isômeros C2 benzenodiol, 4,9%. Assim, como na fração BO SE F4, nesta fração foi observada a presença de um único composto com área percentual maior que 1,0 % pertencente à classe química hidrocarboneto, entretanto, a área percentual foi somente de 2,0%.

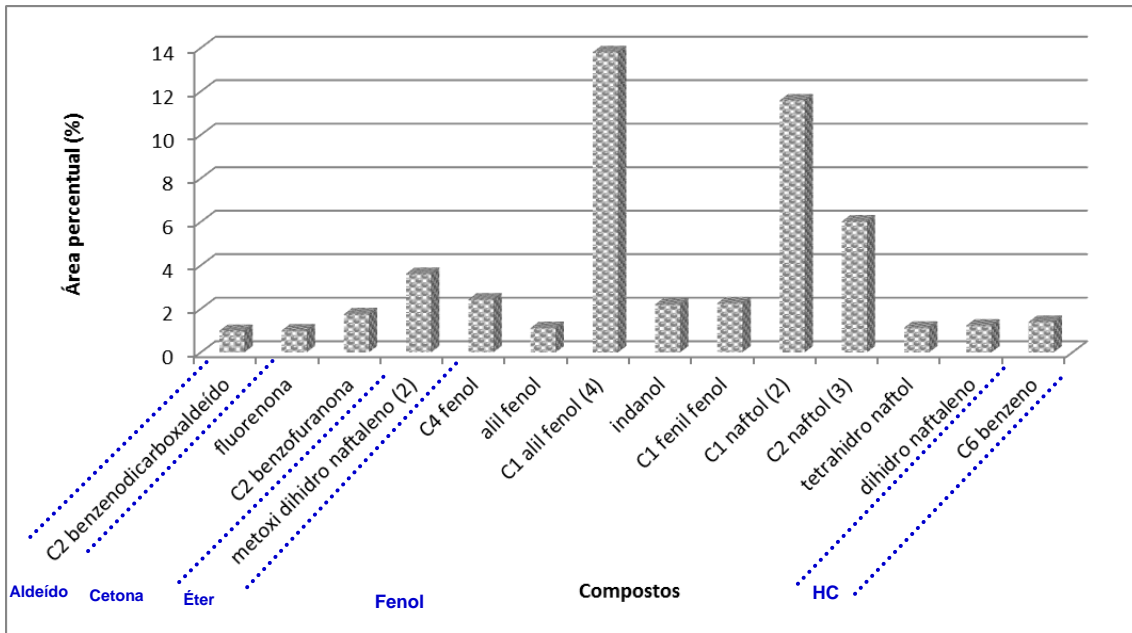


Figura 22: Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (> 1,0% em área) na fração BO SE F4 obtida com o fracionamento do bio-óleo de serragem analisado por GCxGC/TOFMS. O número entre parênteses representa o número de isômeros.

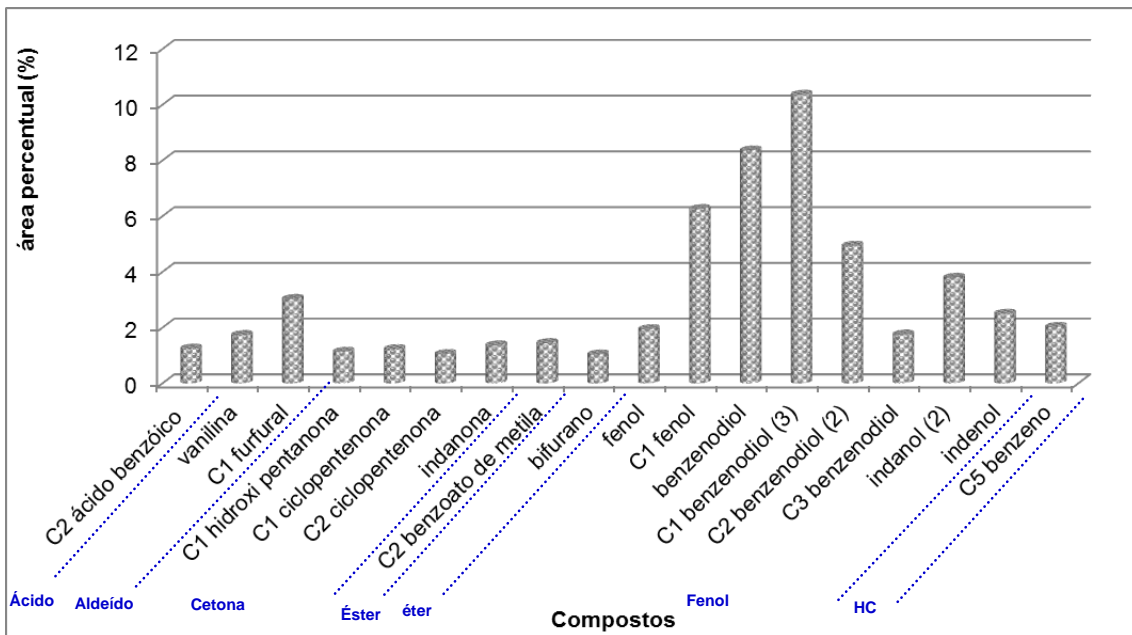


Figura 23: Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (> 1,0% em área) na fração BO SE F5 obtida com o fracionamento do bio-óleo de serragem analisado por GCxGC/TOFMS. O número entre parênteses representa o número de isômeros.

4.2.1.4 Análise dos extratos orgânicos da fração aquosa do bio-óleo de serragem

Os compostos orgânicos presentes na fração aquosa do bio-óleo de serragem foram extraídos utilizando LLE e SPE. O perfil cromatográfico obtido via GCxGC/TOFMS para ambos os extratos pode ser visualizado na **Figura 24**. Observa-se que os perfis de ambas

as amostras foram muito semelhantes. No extrato SPE foram tentativamente identificados 125 compostos e no extrato LLE 124 compostos com área percentual maior que 0,01.

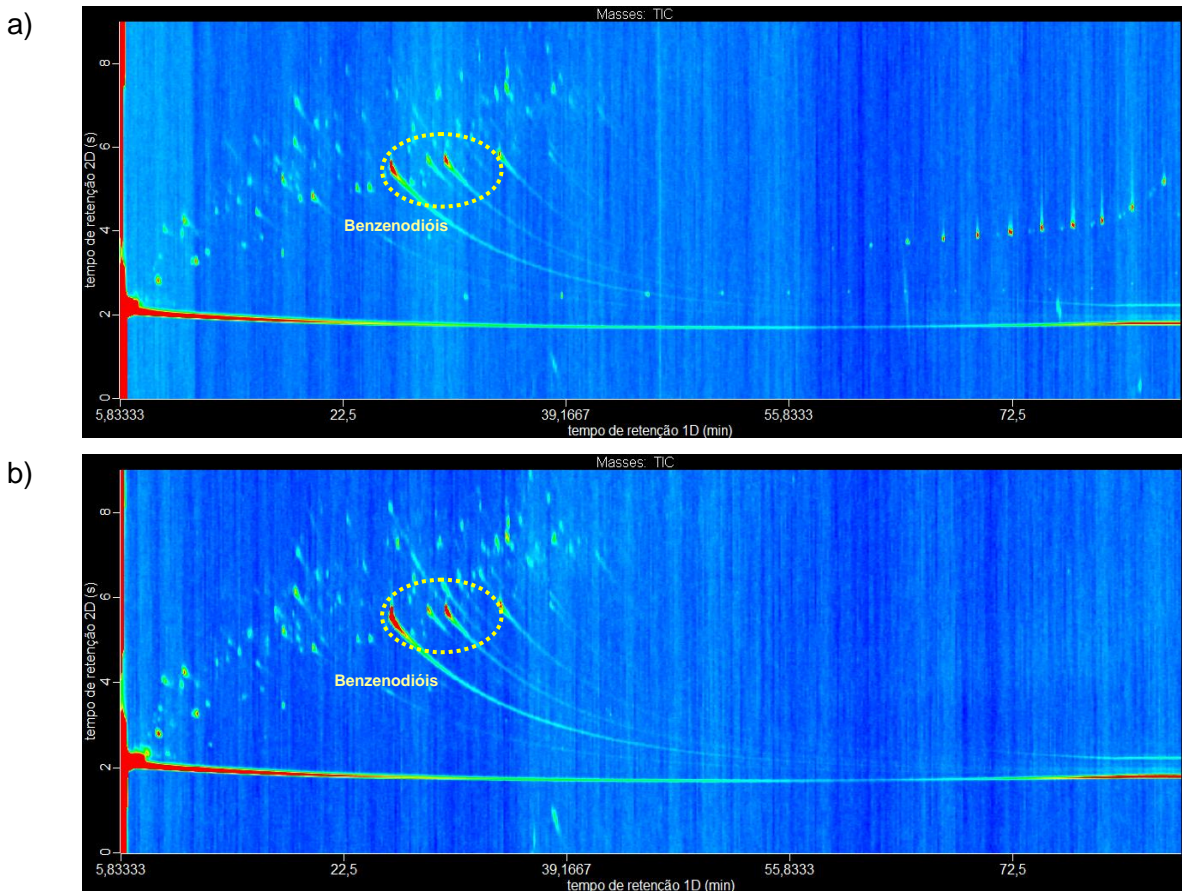


Figura 24: Diagramas de cores obtidos pela análise via GCxGC/TOFMS dos extratos orgânicos da fase aquosa do bio-óleo de serragem. A) Diagrama de cores para os compostos extraídos por LLE. B) Diagrama de cores para os compostos extraídos por SPE.

De acordo com os gráficos de dispersão dos compostos presentes nos extratos (**Fig. 25**), os compostos identificados em ambos os extratos pertencem às seguintes classes químicas: ácidos carboxílicos, álcoois, aldeídos, cetonas, éteres, ésteres, fenóis, hidrocarbonetos e derivados de açúcar.

O perfil da dispersão espacial dos compostos presentes nos extratos SPE e LLE são muito similares. Apesar da presença de algumas sobreposições de compostos pertencentes a classes distintas, observa-se uma razoável separação entre algumas classes químicas, como no caso, dos fenóis e dos hidrocarbonetos aromáticos em ambos os extratos. As cetonas estão distribuídas, praticamente, por todo o diagrama em ambos os extratos. Os aldeídos e os éteres são observados no mesmo espaço bidimensional de separação das cetonas e dos fenóis (**Fig. 25**).

O poder de separação da técnica GCxGC/TOFMS também pode ser observado nos gráficos de dispersão para ambos os extratos, pois visualiza-se a coeluições de vários

compostos na 1D que só foram separados e assim identificados em virtude da presença da 2D .

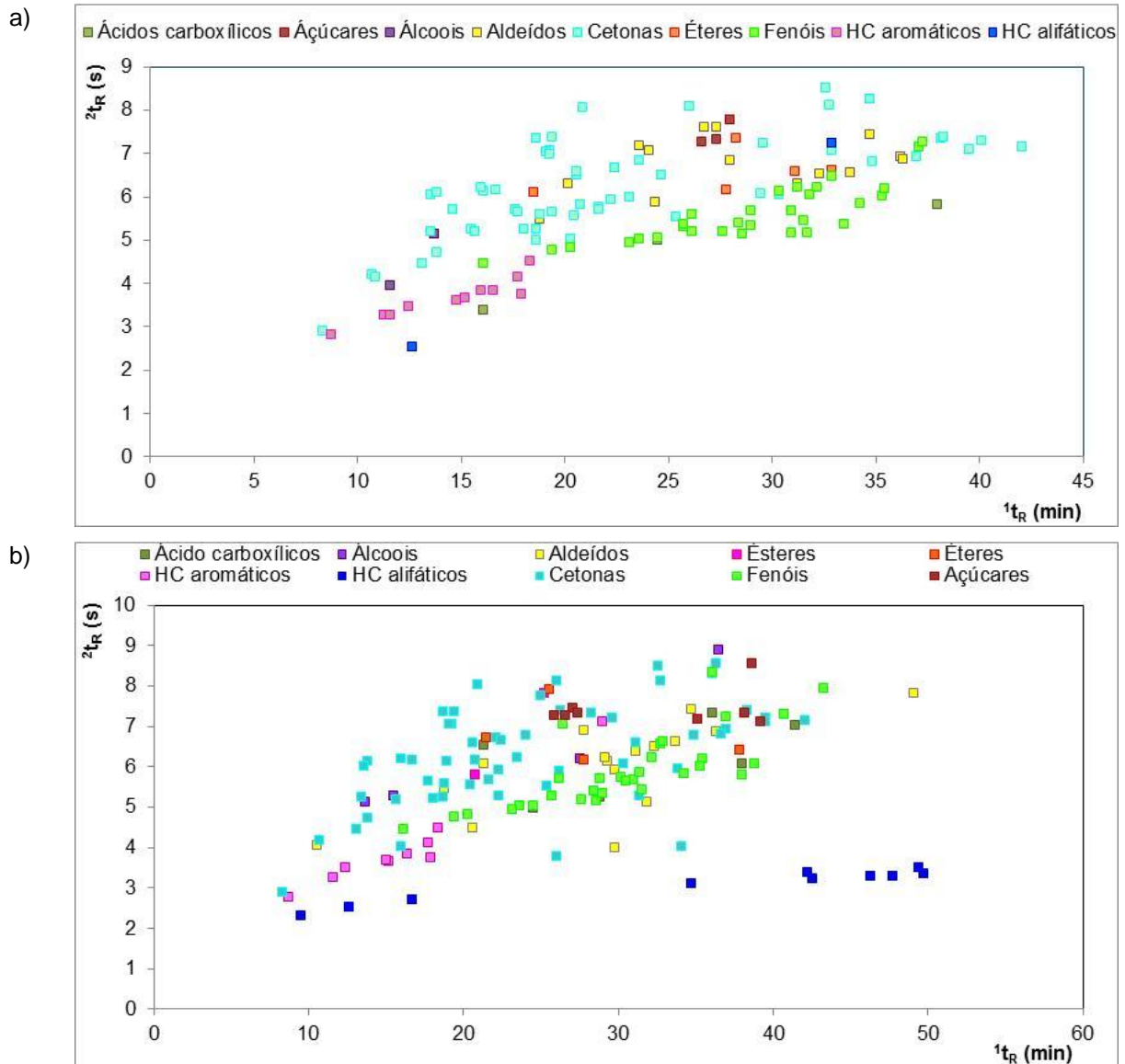


Figura 25: Gráficos de dispersão para as classes de compostos tentativamente identificados na fase aquosa do bio-óleo de serragem por GC \times GC/TOFMS. a) LLE; b) SPE.

Em relação às áreas percentuais dos compostos tentativamente identificados, as principais classes de compostos presentes em ambos os extratos foram fenóis e cetonas. Sendo a área percentual dos fenóis (70,0% e 66,3% para os extratos obtidos por SPE e LLE, respectivamente) muito superior a das cetonas (16,9% para SPE e 19,9% para LLE). A soma das áreas identificadas destas duas classes correspondem à cerca 85% da área total identificada para ambos os extratos (**Fig. 26**). Entretanto, em relação ao número de compostos identificados, as cetonas apresentaram maior número em relação aos fenóis. Isso pode ser em virtude da grande quantidade de isômeros de cetonas identificados em ambos os extratos da fase aquosa.

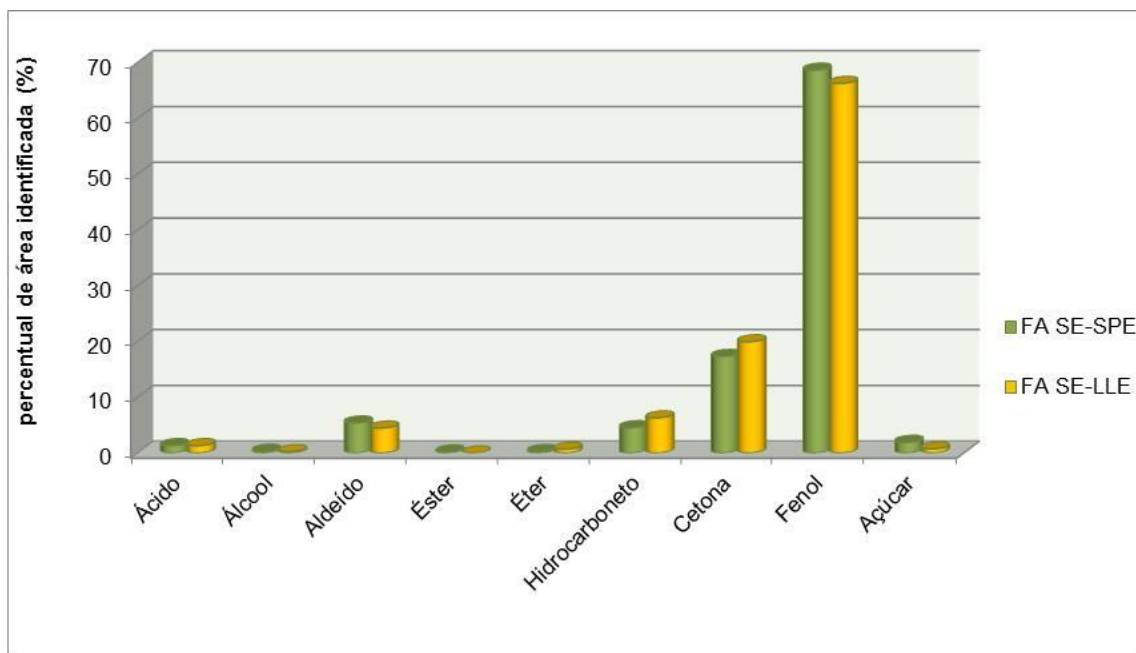


Figura 26: Áreas percentuais dos compostos tentativamente identificados para os extratos obtidos por SPE e LLE da fase aquosa do bio-óleo de serragem através da análise por GCxGC/TOFMS.

Os compostos majoritários (área % superior a 1,0%) presentes em ambos os extratos orgânicos foram fenóis. Sendo que os compostos com maior área percentual em ambos os extratos foram: benzenodiol (33,9% para LLE e 46,8% para SPE), C1 benzenodiol (12,7% para LLE e 7,7% para SPE) e C2 benzenodiol (6,2% para LLE e 5,9 para SPE). As demais classes com percentual em área significativo foram aldeídos (1,9% para LLE relativo a um único composto e 2,9% para SPE relativo à soma de dois compostos), cetonas (8,8% para LLE com um total de 4 compostos e 8,6% para SPE com um total de 5 compostos) e hidrocarbonetos aromáticos (4,3% para LLE e 3,3 para SPE para 2 compostos identificados em cada extrato), conforme **Figura 27**.

Schneider *et al.*³² propuseram uma metodologia para a extração seletiva de compostos fenólicos da fase aquosa de um bio-óleo também obtido a partir de serragem. O método de extração empregado consistiu, primeiramente, de uma extração alcalina, seguido por uma extração líquido-líquido, onde foram utilizados os mesmos solventes orgânicos empregados na obtenção dos extratos do presente trabalho (hexano, diclorometano e tolueno). Os extratos foram analisados a partir da técnica GCxGC acoplada ao espectrômetro de massa quadrupolar (qMS). Foram tentativamente identificados 130 compostos correspondentes a fenóis, éteres, cetonas, aldeídos, ácidos, álcoois e hidrocarbonetos aromáticos, sendo que, o volume dos picos de fenóis corresponde a cerca de 60% do volume total dos compostos tentativamente identificados. Os majoritários foram 4-metil 1,2-benzenodiol (12,1%), 1,2-benzenodiol (11,1%), C2-benzenodiol (7,1%) e fenol

(4,8%). Os resultados demonstram muita similaridade com os encontrados no presente trabalho, apesar do último, não empregar a extração alcalina.

De acordo com os resultados obtidos, as técnicas avaliadas apresentaram resultados muito similares, pois extraíram praticamente os mesmos compostos, entretanto, a maioria dos compostos majoritários identificados apresenta maior área percentual nos extratos obtidos por LLE (**Fig. 27**).

Os resultados da análise da fase aquosa do bio-óleo evidenciam a importância do estudo da mesma. Uma vez que, a fase aquosa é resultante das reações de desidratação que ocorrem durante a pirólise e também da adição de água no bio-óleo após o processo de pirólise para favorecer a separação das fases (aquosa e orgânica) e ajudar na remoção de compostos mais polares do bio-óleo, a extração de compostos presentes em grande quantidade nesta fase, como os fenóis e as cetonas, possibilita a reutilização desta fase no processo, o que representa outra fonte de lucro para as indústrias produtoras, tanto na comercialização destes produtos como na diminuição dos resíduos gerados pelo processo.

Tendo em vista a grande semelhança entre os extratos obtidos com a LLE e SPE da fase aquosa do bio-óleo de serragem (**Figuras 26 e 27**), para a segunda parte do trabalho, onde foram estudados os produtos da pirólise do bagaço de cana, optou-se pelo uso apenas da LLE para extrair os compostos orgânicos das fases aquosas dos bio-óleos.

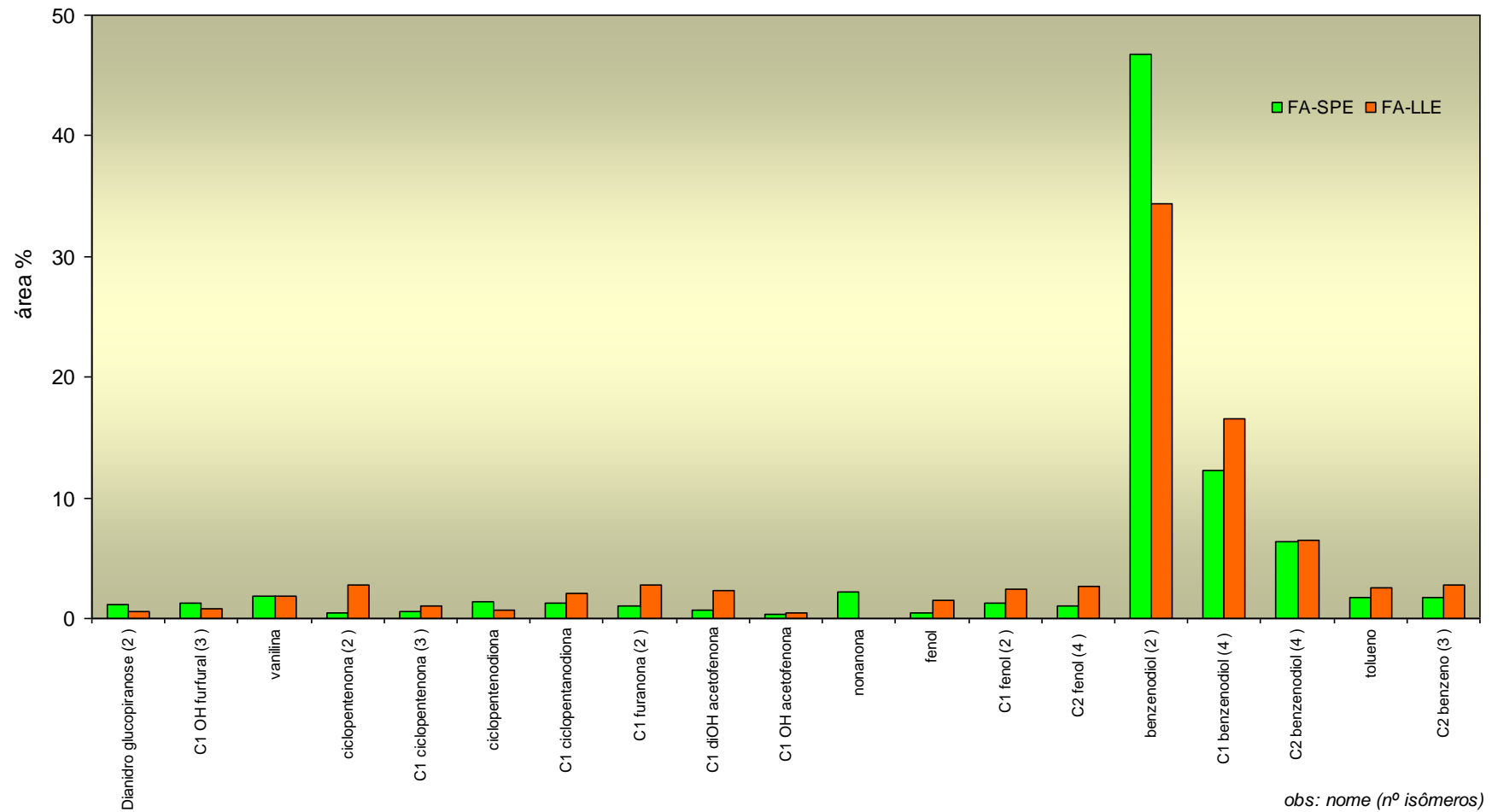


Figura 27: Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (> 1,0 % em área) presentes nos extratos obtidos por SPE e LLE da fase aquosa do bio-óleo de serragem analisado por GC×GC/TOFMS.

4.2.2 Análise dos bio-óleos do bagaço da cana-de-açúcar

A **Figura 28** apresenta os diagramas de cores bidimensionais e tridimensionais (3D) obtidos pela análise via GC×GC/TOFMS dos bio-óleos de bagaço de cana-de-açúcar gerados por pirólise não catalítica e por pirólise catalisada com o ZSM-5.

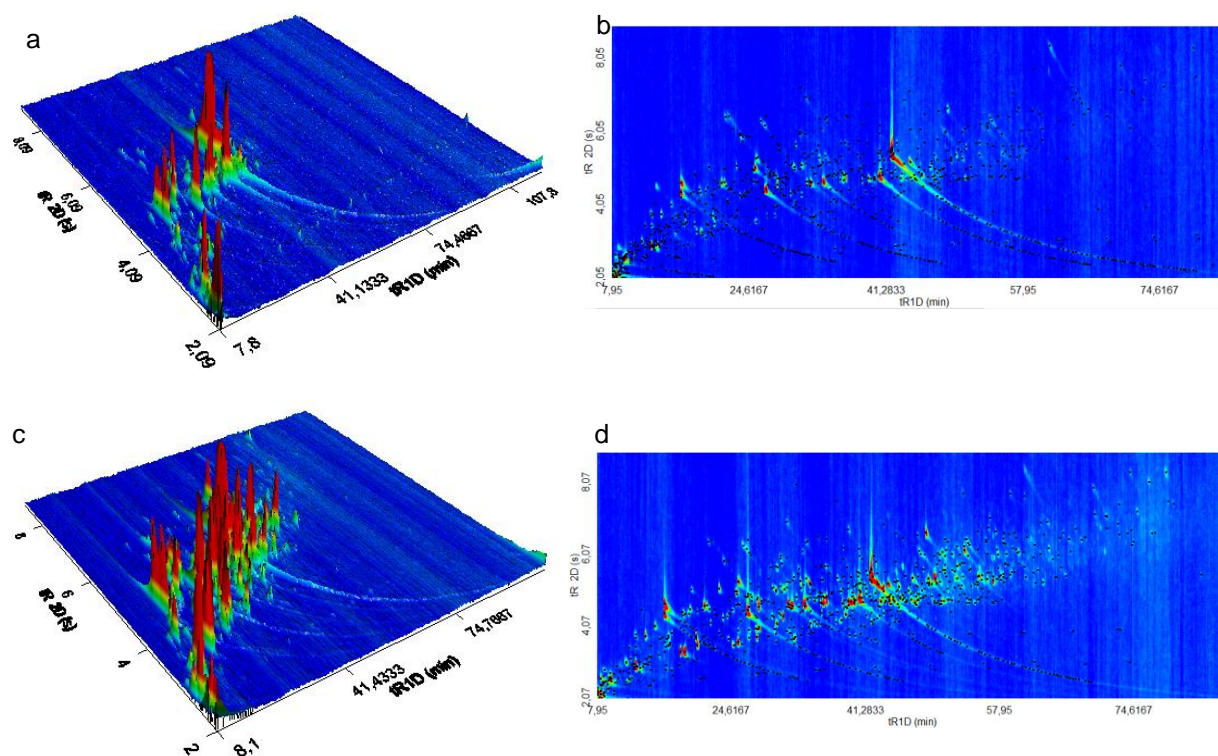


Figura 28: Diagramas de cores bidimensionais e tridimensionais obtidos pela análise via GC×GC/TOFMS dos bio-óleos catalítico e não catalítico do bagaço da cana-de-açúcar. Em a) Gráfico tridimensional para o bio-óleo bruto não catalítico (BO BC); b) Diagrama de cores para o bio-óleo bruto não catalítico (BO BC); c) Gráfico tridimensional para o bio-óleo bruto catalítico (BO BC CAT); d) Diagrama de cores para o bio-óleo bruto catalítico (BO BC CAT).

De acordo com os diagramas de cores (**Fig. 28**) e com os gráficos de dispersão (**Fig. 32 a, b**), os perfis da distribuição dos compostos obtidos pela análise cromatográfica de ambas as amostras foram parecidos, apesar de um dos bio-óleos ser produzido com o uso do catalisador ZSM-5. Este fato pode ser atribuído à semelhança das classes dos compostos identificadas em ambos os bio-óleos. Uma vez que, foram tentativamente identificados compostos pertencentes a todas as classes avaliadas para o bio-óleo não catalítico, enquanto para o bio-óleo catalítico somente não foi identificada a presença de açúcares na composição. Além do mais, em ambos os bio-óleos foram identificados uma

grande quantidade de compostos, 361 e 471 picos para o bio-óleo não catalítico e catalítico, respectivamente, (Tabela IX).

Apesar da semelhança na distribuição dos compostos para ambas as amostras, observa-se uma grande diferença na composição dos dois bio-óleos na análise das áreas percentuais dos compostos tentativamente identificados (Fig. 29 e Tabela IX). Esta diferença está relacionada, principalmente, com a área percentual dos hidrocarbonetos aromáticos. No bio-óleo não catalítico, a área referente aos hidrocarbonetos aromáticos corresponde somente a 7,2%, enquanto para o bio-óleo catalítico a área destes corresponde a 29,4% do total de área identificada. Este resultado demonstra a eficiência do uso do catalisador ZSM-5 no processo de pirólise para a produção de bio-óleo cuja composição favorece o uso deste como biocombustível e como fonte de matéria-prima de compostos como hidrocarbonetos aromáticos, entre eles, benzeno, tolueno e xilenos (BTX), que podem ser utilizados como componentes da gasolina, solventes ou na síntese de vários produtos como detergentes, poliuretanos, plásticos e fibras sintéticas.^{188, 189} Atualmente, compostos BTX são obtidos, principalmente, a partir do petróleo, que é uma fonte não renovável e esgotável. Muitos trabalhos na literatura descrevem o uso do catalisador ZSM-5 na conversão de biomassas em biocombustíveis e bioquímicos, como hidrocarbonetos aromáticos^{67,81, 87} e o apontam como um dos catalisadores mais seletivos para a produção de hidrocarbonetos aromáticos^{75, 190, 191} e redução da presença de compostos oxigenados do bio-óleo.¹⁹²

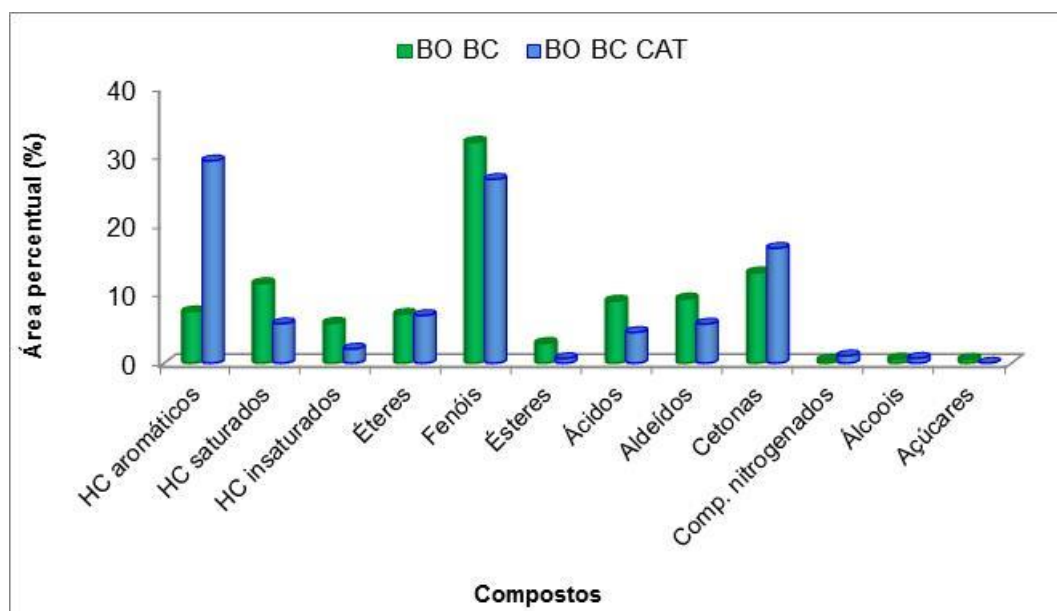


Figura 29: Áreas percentuais dos compostos tentativamente identificados nos bio-óleos brutos (catalítico e não catalítico) do bagaço de cana-de-açúcar obtidos através da análise por GCxGC/TOFMS.

Tabela IX: Número de picos tentativamente identificados (totais e por IR), percentual de picos (totais e por IR) e percentual em área (totais e por IR), para os bio-óleos brutos catalítico e não catalítico do bagaço de cana-de-açúcar, analisados por GC×GC/TOFMS.

Classes	Identificação Total						Identificação LTPRI					
	Picos		Picos (%)		Área (%)		Picos		Picos (%)		Área (%)	
	BO BC	BO BC CAT	BO BC	BO BC CAT	BO BC	BO BC CAT	BO BC	BO BC CAT	BO BC	BO BC CAT	BO BC	BO BC CAT
HC aromáticos	68	113	18,78	23,99	7,47	29,37	33	43	22,92	24,29	5,63	21,29
HC saturados	19	16	5,25	3,40	11,55	5,73	0	1	0,00	0,56	0,00	0,04
HC insaturados	26	39	7,73	8,28	5,80	2,05	6	7	4,17	3,95	2,10	0,09
Éteres	36	47	9,94	9,98	7,11	6,91	11	16	7,64	9,04	1,98	2,68
Fenóis	41	61	11,33	12,95	32,09	26,68	24	32	16,67	18,08	31,09	24,66
Ésteres	21	12	5,80	2,55	2,88	0,65	7	6	4,86	3,39	0,41	0,15
Ácidos	17	10	4,70	2,12	9,02	4,46	10	6	6,94	3,39	8,51	4,33
Aldeídos	29	42	8,01	8,92	9,33	5,68	11	16	7,64	9,04	8,54	4,16
Cetonas	82	105	22,38	22,29	13,12	16,69	40	47	27,78	26,55	9,85	10,85
Nitrogenados	13	15	3,59	3,18	0,43	1,06	2	2	1,39	1,13	0,03	0,03
Álcoois	5	11	1,38	2,34	0,62	0,70	0	1	0,00	0,56	0,00	0,25
Açúcares	4	0	1,10	0,00	0,58	0,00	0	0	0,00	0,00	0,00	0,00
TOTAL	361	471	100	100	100	100	144	177	100	100	68,14	68,54

O enriquecimento do bio-óleo, obtido por pirólise catalítica, em hidrocarbonetos aromáticos acompanhou a diminuição de compostos oxigenados presentes na composição do bio-óleo. A área percentual dos éteres diminuiu de 7,1% para 6,9%; dos fenóis de 32,1% para 26,7%; dos ésteres de 2,88 para 0,65%; dos ácidos de 9,0 para 4,5% e dos aldeídos de 9,3 para 5,7%. No bio-óleo catalítico também não foi verificada a presença de açúcares na sua composição (**Tabela IX e Fig. 29**). Estes resultados foram esperados, uma vez que, o catalisador ZSM-5 minimiza a formação de compostos oxigenados, convertendo o oxigênio presente, principalmente em H₂O, CO e CO₂, dependendo das condições empregadas na pirólise.⁸⁰ A presença do catalisador não diminuiu a área percentual das cetonas, assim como observado no trabalho de Pattiya, *et al.*⁵⁹

Da mesma forma que a composição do bio-óleo gerado por uma pirólise sofre influência do tipo de biomassa empregada, o desempenho do catalisador durante uma pirólise rápida catalítica também é influenciado pela composição e estrutura da biomassa utilizada no processo.⁸¹ Neste sentido, Zheng *et al.*⁸¹ avaliaram o efeito do tamanho do cristal do ZSM-5 e a contribuição de diferentes matérias-primas (celulose, hemicelulose, lignina, pinha, sabugo e palha de milho) no rendimento de hidrocarbonetos aromáticos produzidos a partir de uma pirólise rápida catalítica. Os resultados obtidos demonstraram que a distribuição dos compostos gerados foi afetada pela espécie de matéria-prima avaliada, ou seja, o rendimento de aromáticos foi maior para a celulose seguido da hemicelulose e por fim, da lignina. De acordo com os autores, esse resultado pode ser atribuído à diferença existente na estrutura química da celulose, hemicelulose e lignina.

A biomassa bagaço de cana-de-açúcar apresenta em sua constituição cerca de 41% de celulose, 25% de hemicelulose e cerca de 20% de lignina (valores em massa no bagaço integral seco).¹⁹³ De acordo com os resultados obtidos pelo Zheng *et al.*⁸¹, o bagaço de cana-de-açúcar pode ser considerado uma boa biomassa para a obtenção de hidrocarbonetos aromáticos produzidos a partir de uma pirólise catalisada por ZSM-5, em virtude da grande proporção de celulose e hemicelulose na sua constituição. Além do mais, a constituição do bagaço da cana-de-açúcar justifica a presença da grande quantidade de compostos oxigenados de baixo peso molecular, como éteres, cetonas, aldeídos, ácidos carboxílicos e ésteres nos bio-óleos avaliados no presente trabalho. Pois, de acordo com os resultados reportados por Zheng *et al.*⁸¹, durante a pirólise rápida catalisada da celulose, ocorre primeiramente a decomposição térmica da celulose para formar açúcares anidros. Ao mesmo tempo, reações de policondensação de celulose, que formam carvão, competem com as quebras das ligações da cadeia da celulose, que produzem compostos oxigenados de baixo peso molecular (éteres, cetonas, aldeídos, ácidos carboxílicos e ésteres). Os anidros açúcares também podem sofrer reações de desidratação para formar furanos. Furanos e outros compostos oxigenados se difundem nos canais das zeolitas e formam

hidrocarbonetos aromáticos, olefinas e outros gases através de uma série de reações como desidratação, oligomerização, descarbonilação e descarboxilação.^{85, 190} Na pirólise catalítica rápida da hemicelulose e da lignina ocorrem reações de decomposição, sendo que no caso da hemicelulose ocorre à formação de piranos e furanos e na decomposição da lignina ocorre à formação de fenóis. Esses compostos formados também podem se difundir nos poros das zeolitas e formarem hidrocarbonetos aromáticos e olefinas.^{85, 190}

A composição da biomassa empregada no processo de pirólise rápida catalítica também influencia a especificidade do catalisador empregado no processo.⁸¹ No bio-óleo do bagaço de cana obtido pela pirólise catalisada com ZSM-5 observou-se grande quantidade de compostos policíclicos aromáticos entre os hidrocarbonetos aromáticos. Em torno de 50% da área percentual tentativamente identificada dos hidrocarbonetos aromáticos corresponde a indenos, naftalenos, fluorenos, antracenos e fenantrenos. No bio-óleo não catalítico esse percentual foi em torno de 40%. O maior percentual para os hidrocarbonetos policíclicos aromáticos no bio-óleo catalítico com ZSM-5 pode ser em virtude da biomassa empregada, bagaço de cana-de-açúcar, apresentar um alto teor de celulose em sua composição. Pois, de acordo com o trabalho de Zheng *et al.*⁸¹ o catalisador ZSM-5 apresentou maior seletividade para a obtenção de compostos policíclicos aromáticos quando se empregou celulose como biomassa.

Em relação à análise do bio-óleo bruto do bagaço de cana-de-açúcar não catalítico (**Tabela IX**) observou-se a presença das mesmas classes químicas encontradas no bio-óleo bruto produzido a partir da pirólise rápida da palha de cana-de-açúcar, descritas no trabalho produzido por Cunha *et al.*¹²⁹ e as mesmas observadas no bio-óleo de serragem (**Tabela VIII**). Entretanto, observou-se uma diferença na distribuição dos compostos em relação ao percentual de área identificada. No bio-óleo bruto do bagaço da cana, os compostos com maiores percentuais de área identificada correspondem a fenóis (32,1%), cetonas (13,1%) e hidrocarbonetos saturados (11,5%) (**Tabela IX**), enquanto no bio-óleo da palha, os compostos correspondem a açúcares (38,9%), fenóis (12,2%), hidrocarbonetos alifáticos (11,4%) e cetonas (11,0%).¹²⁹ Entretanto, de acordo com Cunha *et al.*¹²⁹, o grande percentual de açúcar na composição do bio-óleo da palha pode ser em virtude da ineficiência do processo de pirólise na quebra das macromoléculas da biomassa. Outra diferença em relação à composição do bio-óleo do bagaço com o de palha de cana refere-se à presença dos hidrocarbonetos aromáticos. No bio-óleo de palha o percentual de área correspondente aos hidrocarbonetos foi de 0,1% (Cunha *et al.*¹²⁹), enquanto no obtido do bagaço de cana o percentual foi de 7,5% (**Tabela IX**). No bio-óleo de serragem observou-se uma maior contribuição, em área percentual, dos compostos oxigenados quando comparado com o bio-óleo do bagaço da cana-de-açúcar. No bio-óleo de serragem os compostos com maiores áreas percentuais foram fenóis (35,0%), cetonas (23,1%), aldeídos (17,9%) seguido

por hidrocarbonetos totais (11,9%) (**Tabela VIII**), enquanto no bio-óleo do bagaço a área percentual para estes compostos corresponderam a: 32,1%, 13,1%, 9,3% e 24,8%, respectivamente (**Tabela IX**).

A identificação tentativa dos compostos foi confirmada por comparação do LTPRI calculado para cada composto com o encontrado na literatura para o mesmo. No bio-óleo bruto não catalítico (BO BC) 39,9% dos compostos foram confirmados pelo LTPRI, estes correspondem à área percentual de 68,1%. As classes que apresentam maior número de compostos identificados por LTPRI foram cetonas (40), hidrocarbonetos aromáticos (33) e fenóis (24) que correspondem às áreas percentuais de 9,9%, 5,6% e 31,1%, respectivamente. Para o bio-óleo bruto catalítico (BO BC CAT) 37,6% dos compostos foram confirmados pelo LTPRI, que correspondem a 68,5% de área percentual identificada. As classes com maior número de compostos identificados por índice de retenção também foram cetonas (47), hidrocarbonetos aromáticos (43) e fenóis (32) que correspondem às áreas percentuais de 10,9%, 21,3% e 24,7%, respectivamente (**Tabela IX**).

4.2.2.1 Análise das frações dos bio-óleos do bagaço de cana-de-açúcar obtidas com o fracionamento PLC

De acordo com os diagramas de cores bidimensionais e tridimensionais (**Fig. 28**) e com os gráficos de dispersão (**Fig. 32**) obtidos para os bio-óleos do bagaço de cana-de-açúcar catalítico e não catalítico ambos bio-óleos apresentaram elevada complexidade com muitas coeluições, justificando o emprego da técnica de fracionamento sugerida.

Desta forma, as amostras de bio-óleos foram fracionadas em seis frações, da mesma maneira que o bio-óleo proveniente de serragem. Entretanto, em virtude das similaridades entre as duas primeiras frações (F1 e F2) e entre as duas últimas frações (F4 e F5) observadas no fracionamento do bio-óleo de serragem, uniu-se estas no fracionamento do bio-óleo de bagaço e denominou-se F1+F2 e F4+F5, respectivamente. Neste fracionamento, também não foi possível identificar nenhum composto no diagrama de cores para a fração eluída com metanol (F6). A **Figura 30** apresenta os diagramas tridimensionais (3D) para as frações obtidas com o fracionamento dos bio-óleos de bagaço de cana-de-açúcar catalítico (BO BC CAT) e não catalítico (BO BC).

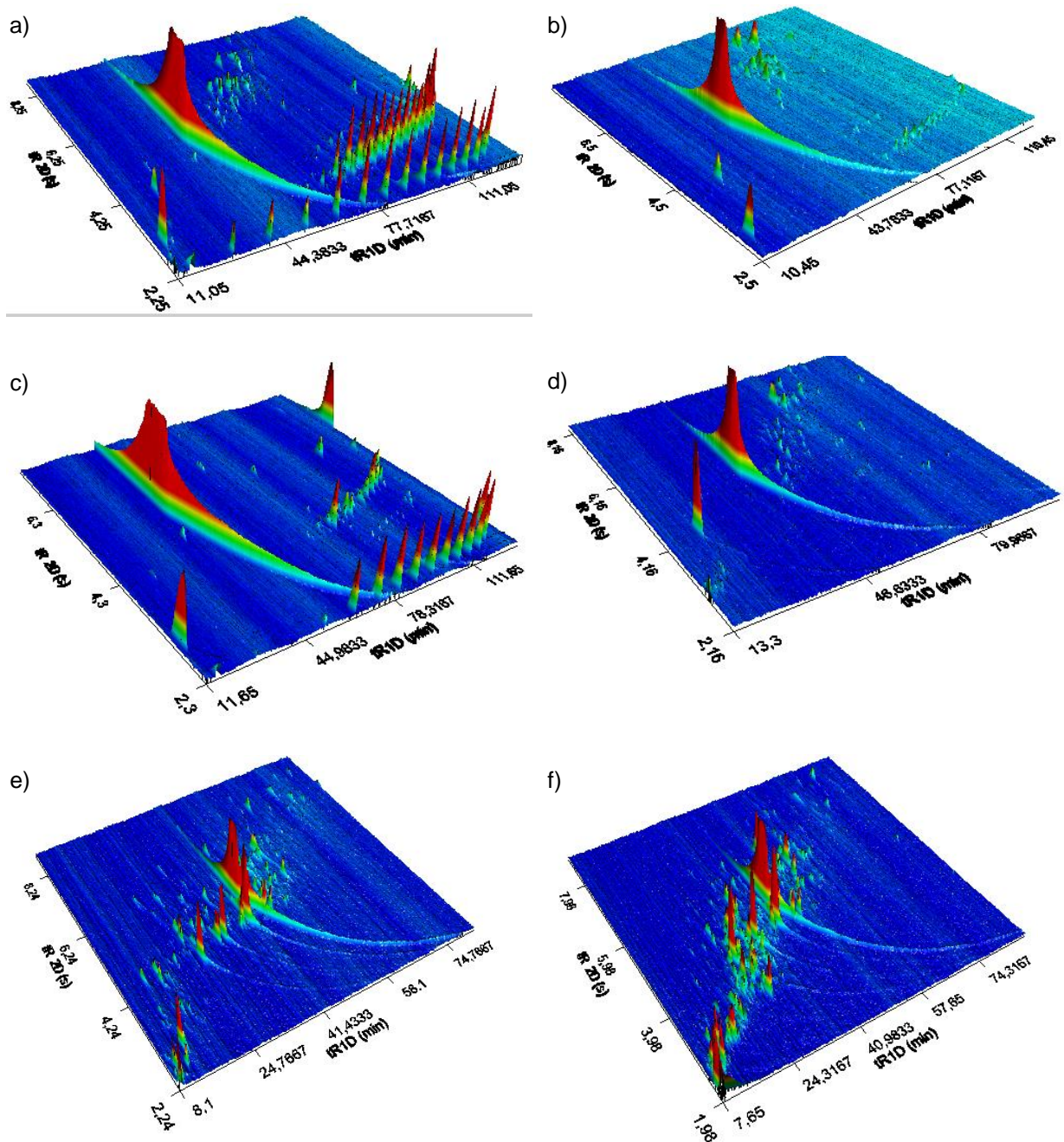


Figura 30: diagramas de cores 3D obtidos pela análise via GCxGC/TOFMS das frações obtidas com o fracionamento dos bio-óleos catalítico e não catalítico do bagaço da cana-de-açúcar. Em a) Fração F1+F2 do bio-óleo não catalítico (BO BC F1+F2); b) Fração F1+F2 do bio-óleo catalítico (BO BC CAT F1+F2); c) Fração 3 do bio-óleo não catalítico (BO BC F3); d) Fração 3 do bio-óleo catalítico (BO BC CAT F3); e) Fração F4+F5 do bio-óleo não catalítico (BO BC F4+F5); f) Fração F4+F5 do bio-óleo catalítico (BO BC CAT F4+F5).

Assim como observado para o bio-óleo proveniente de serragem, o fracionamento dos bio-óleos do bagaço de cana-de-açúcar apresentou bons resultados, uma vez que, as frações apresentam diferentes distribuições e proporções dos compostos identificados de acordo com os solventes utilizados na eluição dos mesmos da coluna de fracionamento, conforme **Tabelas X, XI e Figura 31**.

As frações BO F1+F2 de ambos os bio-óleos apresentam um perfil de separação semelhante, com compostos distribuídos nas regiões de baixa e alta polaridade (**Fig. 30**). Na fração BOBC F1+F2 foram tentativamente identificados 379 compostos, sendo 63,6% correspondentes à soma dos hidrocarbonetos aromáticos, saturados e insaturados. Esse percentual corresponde a 83,9% da área total identificada. Entre os compostos oxigenados com maior número de compostos identificados estão os éteres (10,5%) e aldeídos (8,4%), cuja soma das áreas percentuais foi de 8,4% do total identificada (**Tabela X e Fig. 31a**). Na fração BO BC CAT F1+F2 dos 291 compostos tentativamente identificados 79,0% referem-se à soma dos hidrocarbonetos aromáticos, saturados e insaturados que correspondem à área percentual de 76,1% do total identificada. Éteres e cetonas estão entre as demais classes de compostos que mais contribuíram com número percentual identificado, 6,9% e 6,5%, respectivamente, que correspondem à área percentual de 12,9% (**Tabela XI e Fig. 31b**). As frações BO F1+F2 obtidas para o bio-óleo catalítico e não catalítico não apresentaram compostos derivados de açúcar, além do mais, na fração do bio-óleo catalítico (BO BC CAT) não foi identificado à presença de ácidos carboxílicos enquanto na fração do bio-óleo não catalítico (BO BC) foi identificado somente um pico sendo classificado como ácido carboxílico (**Tabelas X, XI e Fig. 31**).

A fração F3 obtida com o fracionamento de ambos os bio-óleos apresentou o menor número de compostos identificados (114 e 245 para o bio-óleo não catalítico e catalítico, respectivamente), mesmo comportamento obtido com o fracionamento do bio-óleo de serragem. Outra semelhança com o fracionamento do bio-óleo de serragem refere-se à distribuição dos compostos, ou seja, esta fração apresentou uma razoável quantidade de compostos com características apolares e polares. No bio-óleo BO BC F3, 30,7% foram hidrocarbonetos (51,9% em área identificada) e 69,3% referem-se aos compostos oxigenados (48,1% em área identificada), principalmente ésteres e aldeídos. No bio-óleo BO BC CAT F3, 13,1 % dos compostos correspondem a hidrocarbonetos (14,8% em área tentativamente identificada) e 86,9% correspondem a compostos oxigenados (85,2% em área identificada), principalmente cetonas e fenóis (**Tabelas X, XI e Fig. 31**).

Nas frações obtidas com os solventes mais polares (BO F4+F5) foram tentativamente identificados 339 e 409 compostos para o bio-óleo BO BC e BO BC CAT, respectivamente. A maioria correspondem a compostos oxigenados, principalmente cetonas, fenóis e aldeídos. Para a fração do bio-óleo BO BC F4+F5, 92,9% dos picos tentativamente identificados referem-se a compostos oxigenados, os quais correspondem a uma área 67,6% do total identificada. Sendo que a área percentual referente a fenóis corresponde a 34,5% da área total identificada. Para a fração do bio-óleo BOBC CAT F4+F5, 87,5% dos picos tentativamente identificados correspondem a compostos oxigenados, sendo que este percentual corresponde a uma área de 87,8%. Cetonas e fenóis

foram os principais compostos tentativamente identificados, 31,3% (área percentual de 18,9%) e 8,6% (área percentual de 33,1%), respectivamente. O percentual de picos referentes aos hidrocarbonetos foi somente de 12,5% que corresponde a uma área de 12,2%. Entre as frações obtidas com o fracionamento, foi verificada a presença de derivados de açúcares somente nesta fração, para ambos os bio-óleos (**Tabelas X, XI e Fig. 31**).

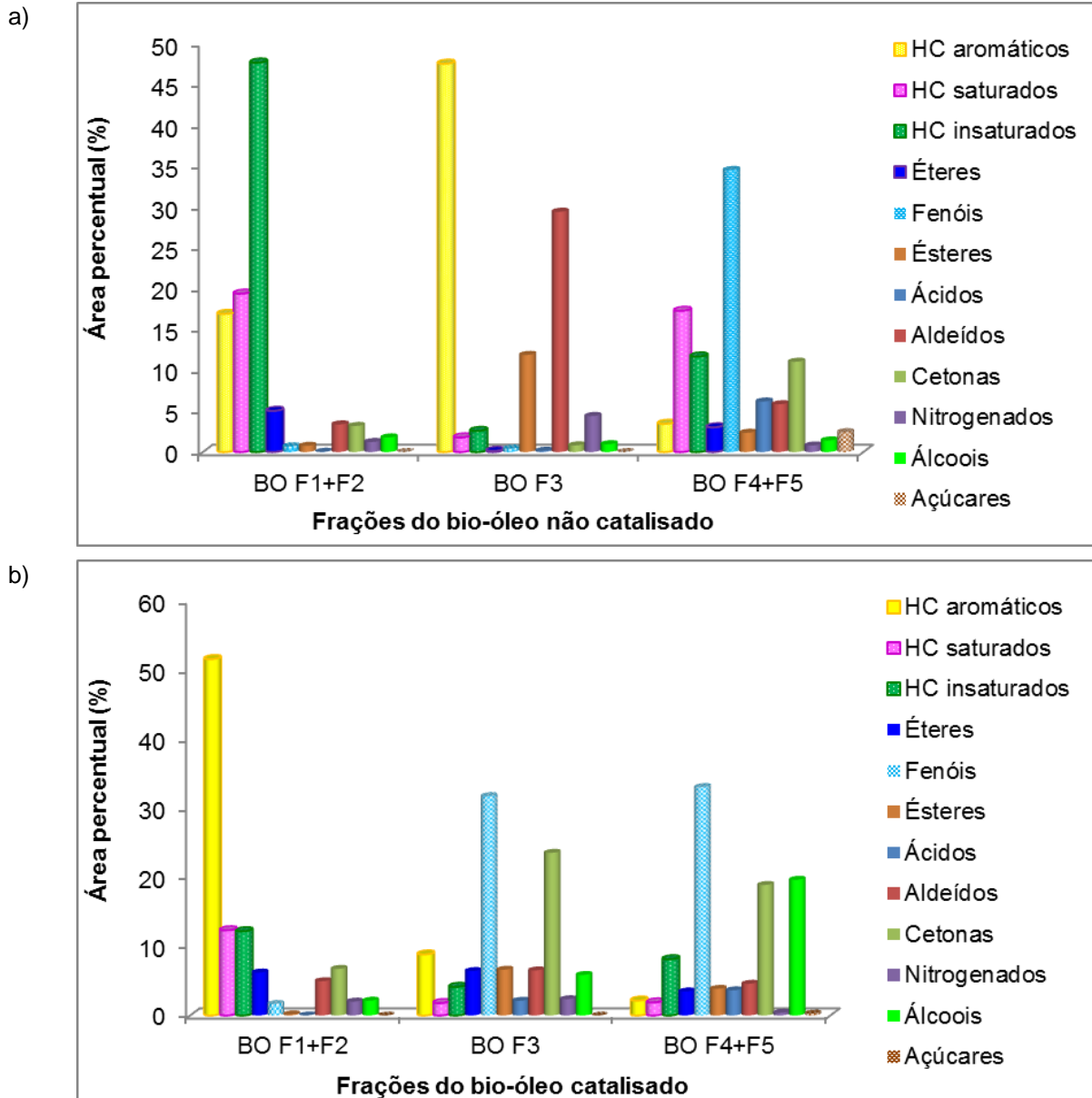


Figura 31: Distribuição das áreas percentuais dos compostos tentativamente identificados nos bio-óleos catalítico e não catalítico do bagaço da cana-de-açúcar. Em a) Frações do bio-óleo não catalítico (BO BC); Em b) Frações do bio-óleo catalítico (BO BC CAT).

Tabela X: Resumo dos resultados obtidos da análise por GCxGC/TOFMS das frações do bio-óleo não catalítico do bagaço de cana-de-açúcar.

Classes	BO BC F1+F2						BO BC F3						BO BC F4+F5					
	Ident. Total			Ident. LTPRI			Ident. Total			Ident. LTPRI			Ident. Total			Ident. LTPRI		
	P	P (%)	A (%)	P	P (%)	A (%)	P	P (%)	A (%)	P	P (%)	A (%)	P	P (%)	A (%)	P	P (%)	A (%)
HC aromáticos	133	35,09	16,90	31	43,66	10,37	5	4,39	47,51	5	16,67	47,47	6	1,77	3,45	6	4,69	2,85
HC saturados	38	10,03	19,37	7	9,86	1,44	14	12,28	1,78	3	10,00	0,17	6	1,77	17,27	1	0,78	4,79
HC insaturados	70	18,47	47,64	9	12,68	18,88	16	14,04	2,57	3	10,00	0,24	12	3,54	11,68	1	0,78	0,29
Éteres	40	10,55	5,04	8	11,27	0,98	4	3,51	0,13	1	3,33	0,01	20	5,90	3,02	7	5,47	2,10
Fenóis	5	1,32	0,69	1	1,41	0,05	3	2,63	0,42	0	0,00	0,00	51	15,04	34,51	27	21,09	31,08
Ésteres	6	1,58	0,75	3	4,23	0,27	27	23,68	11,88	14	46,67	8,86	27	7,96	2,35	5	3,91	0,15
Ácidos	1	0,26	0,03	1	1,41	0,00	1	0,88	0,15	0	0,00	0,00	30	8,85	6,18	18	14,06	5,64
Aldeídos	32	8,44	3,38	7	9,86	0,47	21	18,42	29,40	3	10,00	0,66	33	9,73	5,85	14	10,94	2,29
Cetonas	29	7,65	3,19	1	1,41	0,32	11	9,65	0,81	1	3,33	0,11	109	32,15	11,05	45	35,16	6,55
Nitrogenados	7	1,85	1,23	0	0,00	0,00	3	2,63	4,40	0	0,00	0,00	15	4,42	0,80	1	0,78	0,00
Álcoois	18	4,75	1,78	3	4,23	0,05	9	7,89	0,96	0	0,00	0,00	20	5,90	1,42	3	2,34	0,11
Açúcares	0	0,00	0,00	0	0,00	0,00	0	0,00	0,00	0	0,00	0,00	10	2,95	2,43	0	0,00	0,00
Total	379	100,00	100,00	71	100,00	32,83	114	100,00	100,00	30	100,00	57,52	339	100,00	100,00	128	100,00	55,85

Tabela XI: Resumo dos resultados obtidos da análise por GCxGC/TOFMS das frações do bio-óleo catalítico do bagaço de cana-de-açúcar.

Classes	BO BC CAT F1+F2						BO BC CAT F3						BO BC CAT F4+F5					
	Ident. Total			Ident. LTPRI			Ident. Total			Ident. LTPRI			Ident. Total			Ident. LTPRI		
	P	P (%)	A (%)	P	P (%)	A (%)	P	P (%)	A (%)	P	P (%)	A (%)	P	P (%)	A (%)	P	P (%)	A (%)
HC aromáticos	147	50,52	51,57	26	52,00	20,51	14	5,71	8,84	4	8,00	6,53	11	2,69	2,16	6	5,17	1,28
HC saturados	26	8,93	12,32	9	18,00	5,78	10	4,08	1,80	2	4,00	0,64	6	1,47	1,89	1	0,86	0,18
HC insaturados	57	19,59	12,20	6	12,00	1,50	8	3,27	4,14	0	0,00	0,00	34	8,31	8,14	4	3,45	0,83
Éteres	20	6,87	6,21	5	10,00	0,92	22	8,98	6,43	5	10,00	1,61	27	6,60	3,48	8	6,90	1,24
Fenóis	4	1,37	1,67	0	0,00	0,00	50	20,41	31,75	7	14,00	3,75	35	8,56	33,05	23	19,83	30,69
Ésteres	1	0,34	0,17	1	2,00	0,17	14	5,71	6,63	1	2,00	1,24	10	2,44	3,86	1	0,86	0,44
Ácidos	0	0,00	0,00	0	0,00	0,00	5	2,04	2,13	0	0,00	0,00	18	4,40	3,64	6	5,17	1,24
Aldeídos	8	2,75	4,96	2	4,00	2,41	31	12,65	6,53	10	20,00	1,88	36	8,80	4,59	15	12,93	1,21
Cetonas	19	6,53	6,74	1	2,00	0,12	64	26,12	23,53	18	36,00	8,96	128	31,30	18,88	40	34,48	6,23
Nitrogenados	3	1,03	2,01	0	0,00	0,00	9	3,67	2,35	1	2,00	0,01	2	0,49	0,39	0	0,00	0,00
Álcoois	6	2,06	2,14	0	0,00	0,00	18	7,35	5,87	2	4,00	0,37	97	23,72	19,64	12	10,34	2,83
Açúcares	0	0,00	0,00	0	0,00	0,00	0	0,00	0,00	0	0,00	0,00	5	1,22	0,28	0	0,00	0,00
Total	291	100,00	100,00	50	100,00	31,41	245	100,00	100,00	50	100,00	24,99	409,00	100,00	100,00	116	100,00	46,17

Os resultados obtidos com fracionamento dos bio-óleos provenientes do bagaço da cana-de-açúcar demonstraram similaridade com os obtidos com o fracionamento do bio-óleo de serragem, onde as primeiras frações, F1+F2 apresentaram grande quantidade de compostos apolares (principalmente hidrocarbonetos) e poucos compostos polares, enquanto as últimas frações o resultado foi o oposto, ou seja, grande quantidade de compostos polares (principalmente cetonas e fenóis) e pequena quantidade de compostos com características mais apolares. A fração F3 demonstrou novamente ter características intermediárias, ou seja, apresentou razoável quantidade de compostos com características apolares e polares (**Tabelas X, XI e Fig. 31**).

No fracionamento pressurizado do bio-óleo obtido a partir da palha de cana-de-açúcar proposto por Cunha *et al.*¹²⁹ algumas diferenças foram verificadas na distribuição dos compostos, como por exemplo, a fração F1 (eluída com pentano) apresentou pequena quantidade de hidrocarbonetos, enquanto a fração intermediária F23 (soma da fração 2 (eluída com tolueno) com a fração 3 (eluída com diclorometano) apresentou uma maior proporção de compostos com características polares e apolares, provavelmente em função da união da fração 2 com a fração 3, diferente do que foi feito no presente trabalho (fração 1 foi misturada com a fração 2). Outra diferença foi em relação aos compostos derivados do açúcar que estavam presentes na fração F23 e F45, entretanto, a presença de açúcares em ambas as frações pode ser em virtude da maior quantidade de açúcares encontrado no bio-óleo bruto da palha.

Em relação aos compostos confirmados pelo índice de retenção para as frações obtidas com o fracionamento do bio-óleo não catalítico (BO BC), na fração F1+F2 foram confirmados 71 compostos, 66,2% destes referem-se a hidrocarbonetos. A área percentual dos compostos confirmados pelo índice foi de 32,8%. Na fração F3 foram confirmados pelo LTPRI 30 compostos dos 114 tentativamente identificados, sendo a maioria correspondente a hidrocarbonetos (9 compostos) e ésteres (14 compostos), a área dos compostos confirmados foi de 57,2% do total identificada. Na fração F4+F5 foi possível confirmar 128 compostos, 35,2% e 21,1% destes correspondem a cetonas e fenóis, respectivamente. A área percentual dos compostos confirmados pelo índice de retenção foi de 55,9% (**Tabela X**).

Para as frações obtidas com fracionamento do bio-óleo catalítico (BO BC CAT), o índice de retenção confirmou 50 compostos na fração F1+F2, 82,0% destes correspondem à soma dos hidrocarbonetos. A área percentual dos compostos confirmados pelo índice foi de 31,4% do total tentativamente identificada. Na Fração BOF3, também foram confirmados 50 compostos, 36,0% e 20,0% destes referem-se a cetonas e aldeídos, respectivamente. A soma da área percentual dos compostos confirmados pelo índice foi de 25,0%. Na fração F4+F5, 116 compostos foram confirmados pelo índice de retenção, que corresponde a uma

área percentual de 46,2%. A maioria dos compostos confirmados pelo índice foram cetonas (40) e fenóis (23), respectivamente, sendo a soma da área percentual destes de 36,9% do total identificada (**Tabela XI**).

4.2.2.2 Detalhamento das principais classes de compostos do bio-óleo bruto do bagaço de cana-de-açúcar e das suas frações obtidas com o fracionamento

Para facilitar a identificação dos compostos por classes químicas nos bio-óleos do bagaço de cana-de-açúcar foram construídos gráficos de dispersão, contendo os valores dos tempos de retenção na 1D e na 2D para cada classe química de compostos identificados, como também para as principais subclasses observadas nos bio-óleos, através do programa *Microsoft Excel*TM, da mesma forma que foi feito para o bio-óleo de serragem.

Nos bio-óleos brutos do bagaço de cana de açúcar catalisado e não catalisado foram tentativamente identificados compostos pertencentes às 12 classes químicas avaliadas: hidrocarbonetos aromáticos, saturados e insaturados, éteres, fenóis, ésteres, ácidos, aldeídos, cetonas, compostos nitrogenados, álcoois e derivados de açúcares, conforme os gráficos de dispersão visualizados na **Figura 32**. O perfil de distribuição dos compostos nos dois bio-óleos brutos foi muito similar. Pode-se observar que os compostos estão distribuídos em várias regiões em virtude das diferentes propriedades destes. Verificou-se a presença de compostos com grande variação nos tempos de retenção tanto na 1D como na 2D , assim como, compostos presentes nas regiões de baixa e alta polaridade. Nos dois bio-óleos brutos, observa-se uma boa separação entre os hidrocarbonetos aromáticos, insaturados e saturados. Entretanto, muitos hidrocarbonetos aromáticos estão no mesmo espaço bidimensional dos fenóis, cetonas e aldeídos. Esse comportamento também foi verificado para o bio-óleo de serragem, em virtude da semelhança entre os compostos identificados em ambos os bio-óleos. De acordo com os gráficos de dispersão, muitos compostos só foram identificados em função da 2D , pois apresentam coeluições na 1D , justificando o emprego da técnica GCxGC.

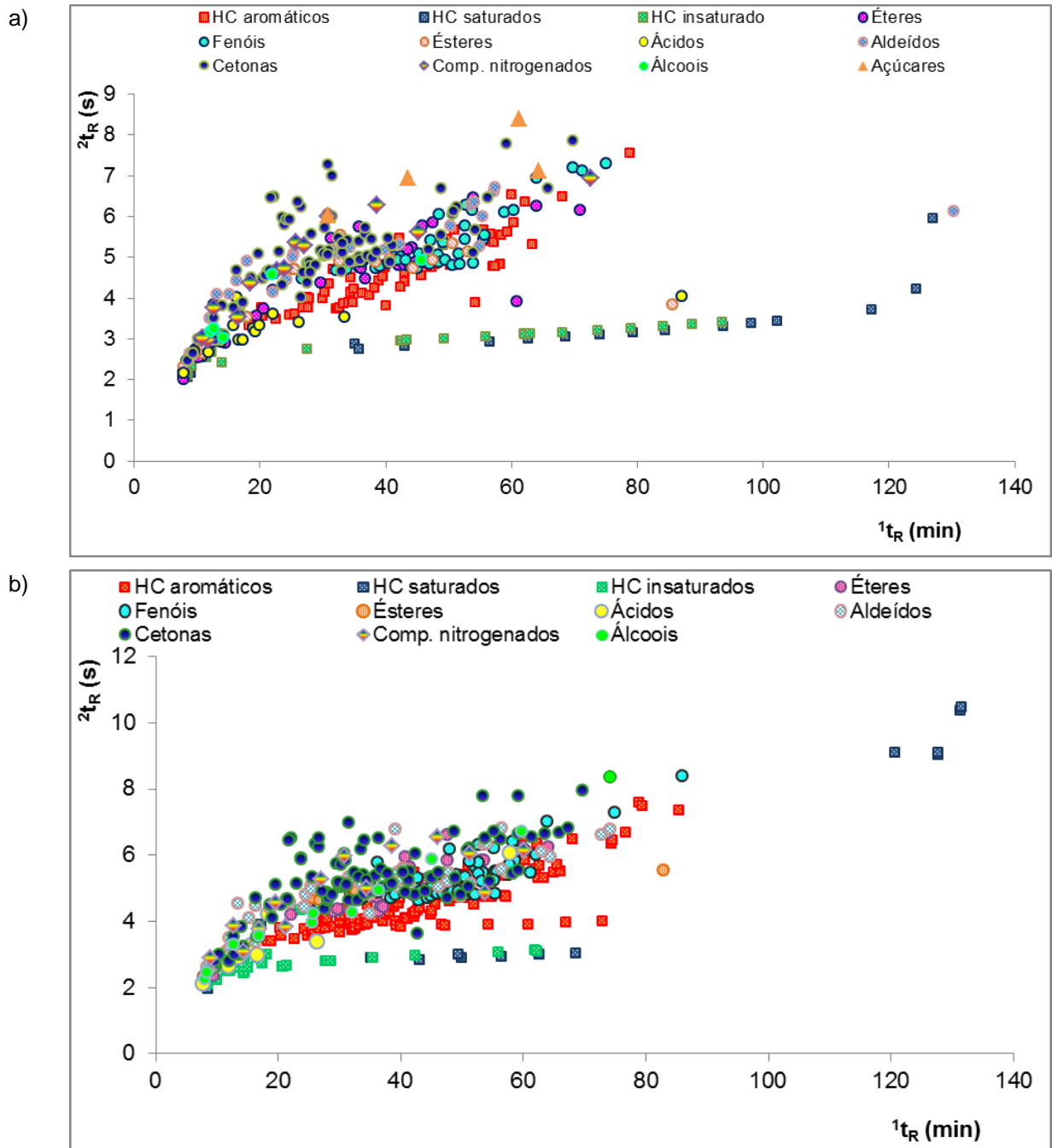
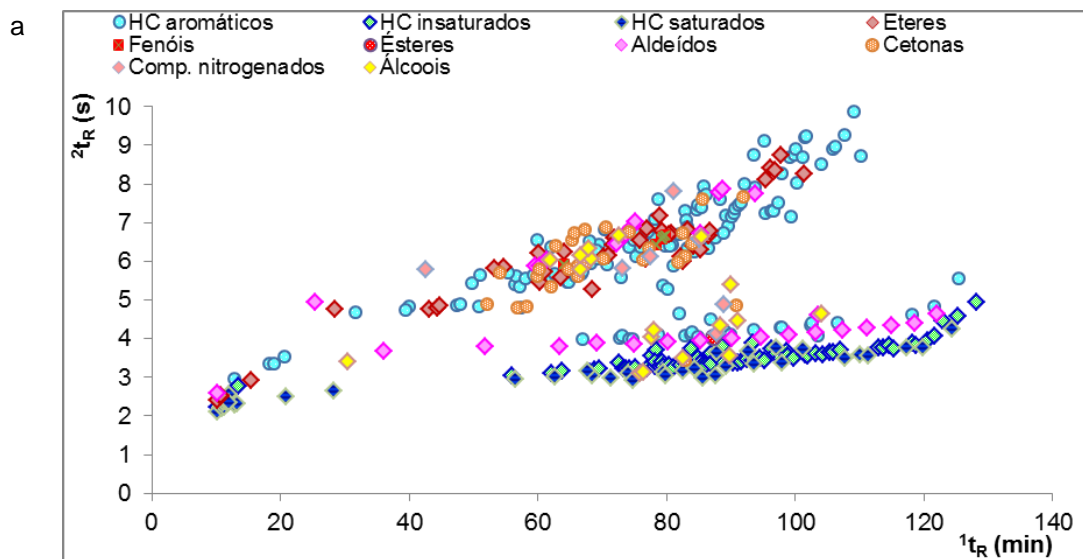


Figura 32: Gráficos de dispersão para os compostos tentativamente identificados nos bio-óleos brutos catalítico e não catalítico do bagaço de cana-de-açúcar analisados por GCxGC/TOFMS. a) Bio-óleo não catalítico (BOBC); b) Bio-óleo catalítico (BOBC CAT).

De acordo com os gráficos de dispersão dos compostos das frações F1+F2 dos bio-óleos não catalítico (**Fig. 33**) e catalítico (**Fig. 34**), as duas frações apresentam as mesmas classes químicas sendo a distribuição espacial destas muito similares. Em relação à separação dos compostos, observa-se uma nítida separação entre os hidrocarbonetos aromáticos e os alifáticos (saturados e insaturados) nas duas frações (**Fig. 33a** e **Fig. 34a**). Além do mais, verificou-se separação entre hidrocarbonetos alifáticos, ou seja, entre os saturados e os insaturados (**Fig. 33b** e **Fig. 34b**). Essa separação pode ser melhor

visualizada diminuindo os números do eixo das ordenadas, conforme **Figura 33c**, onde os hidrocarbonetos insaturados apresentaram um maior tempo de retenção na coluna polar na 2D que os hidrocarbonetos saturados, isso porque os hidrocarbonetos insaturados são levemente menos apolares que os hidrocarbonetos saturados.¹⁹⁴ Em relação aos hidrocarbonetos aromáticos, estes encontram-se numa região de maior polaridade na 2D e verifica-se uma separação estruturada entre eles. Na fração F1+F2 BO BC verifica-se uma nítida separação entre as subclasses dos hidrocarbonetos aromáticos (benzenos, naftalenos, fluorenos, fenantrenos, antracenos e benzofluoreno), conforme **Figura 33d**. Em cada uma dessas subclasses, os compostos foram separados de acordo com o número de carbonos dos radicais ligados a cadeia principal. Na fração F1+F2 BO BC CAT observa-se uma boa separação entre as subclasses benzeno, naftaleno, fluorenos, fenantreno/antraceno, xantenos e pirenos (**Fig. 34c**). A separação entre os compostos pertencentes à subclasse antraceno/fenantreno dos compostos pertencentes à subclasse dihidro antraceno/fenantreno também foi observada nesta fração, conforme detalhe apresentado na **Figura 34c**.



Continua...

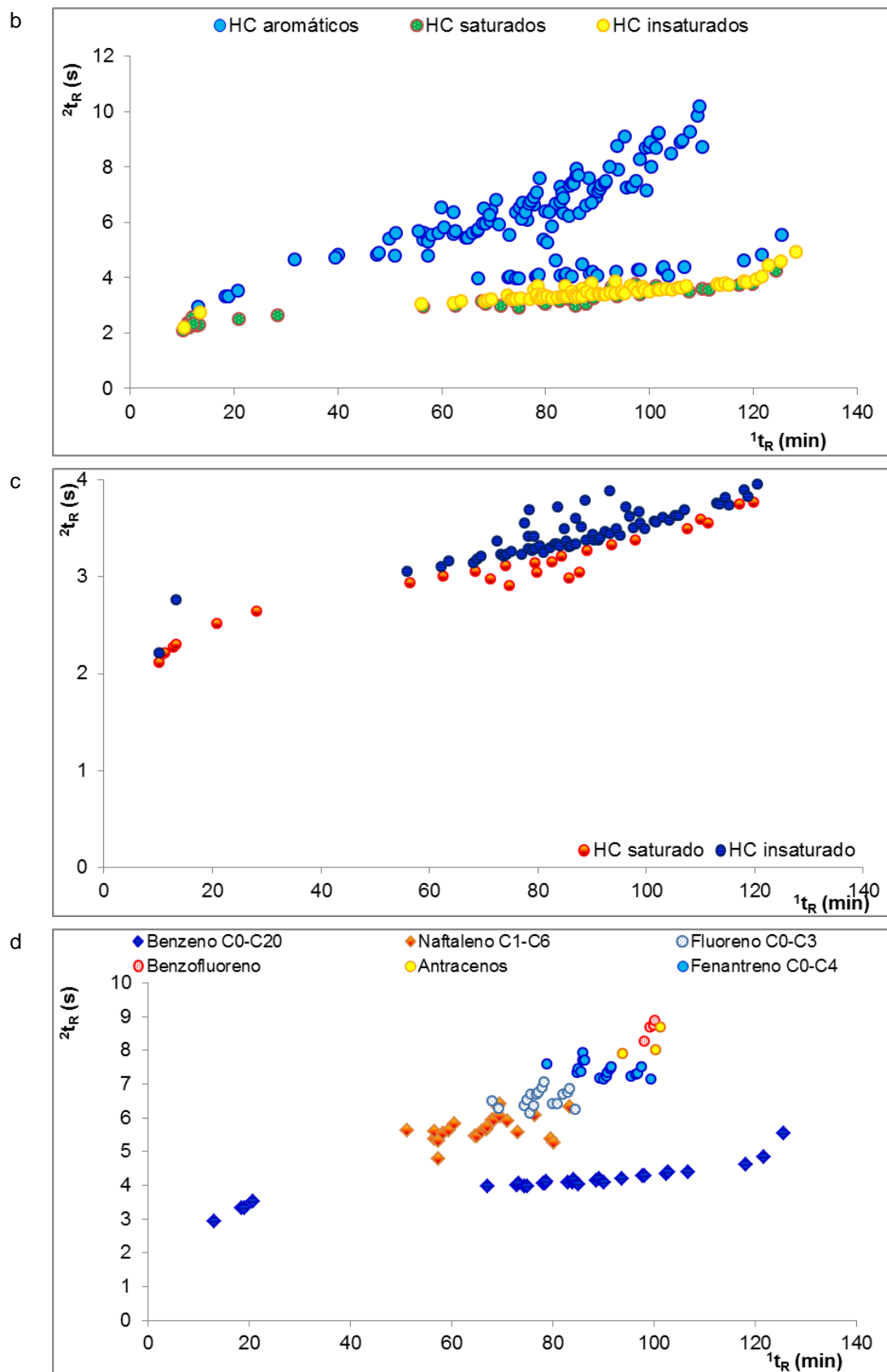


Figura 33: Gráficos de dispersão para as classes de compostos tentativamente identificados na fração F1+F2 do bio-óleo não catalítico (BO BC F1+F2). Em **a**) Todas as classes; **b**) Todos os hidrocarbonetos **c**) Hidrocarbonetos saturados e insaturados alifáticos; **d**) Benzenos, naftalenos, fluorenos, fenantrenos, antracenos, benzofluoreno.

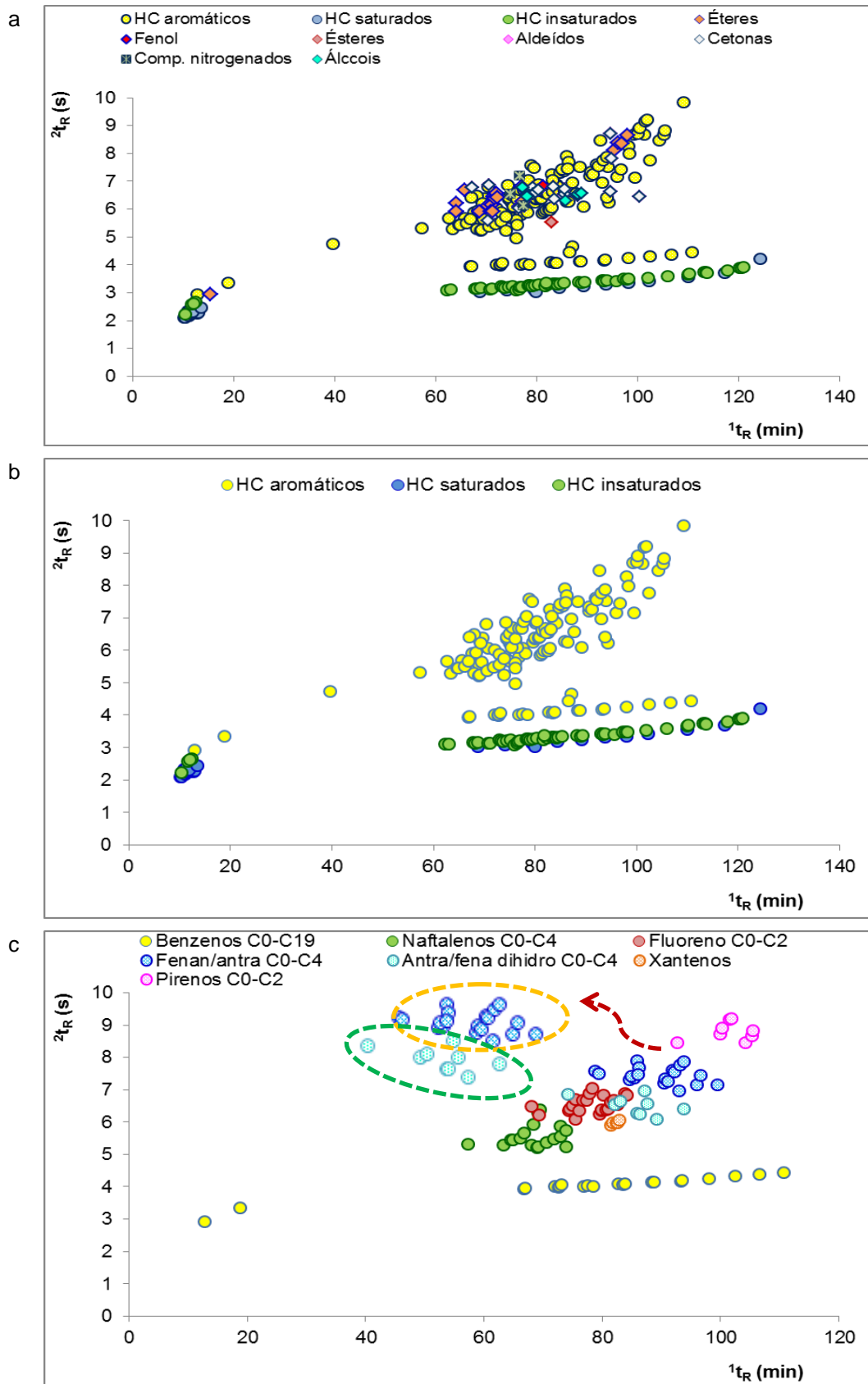
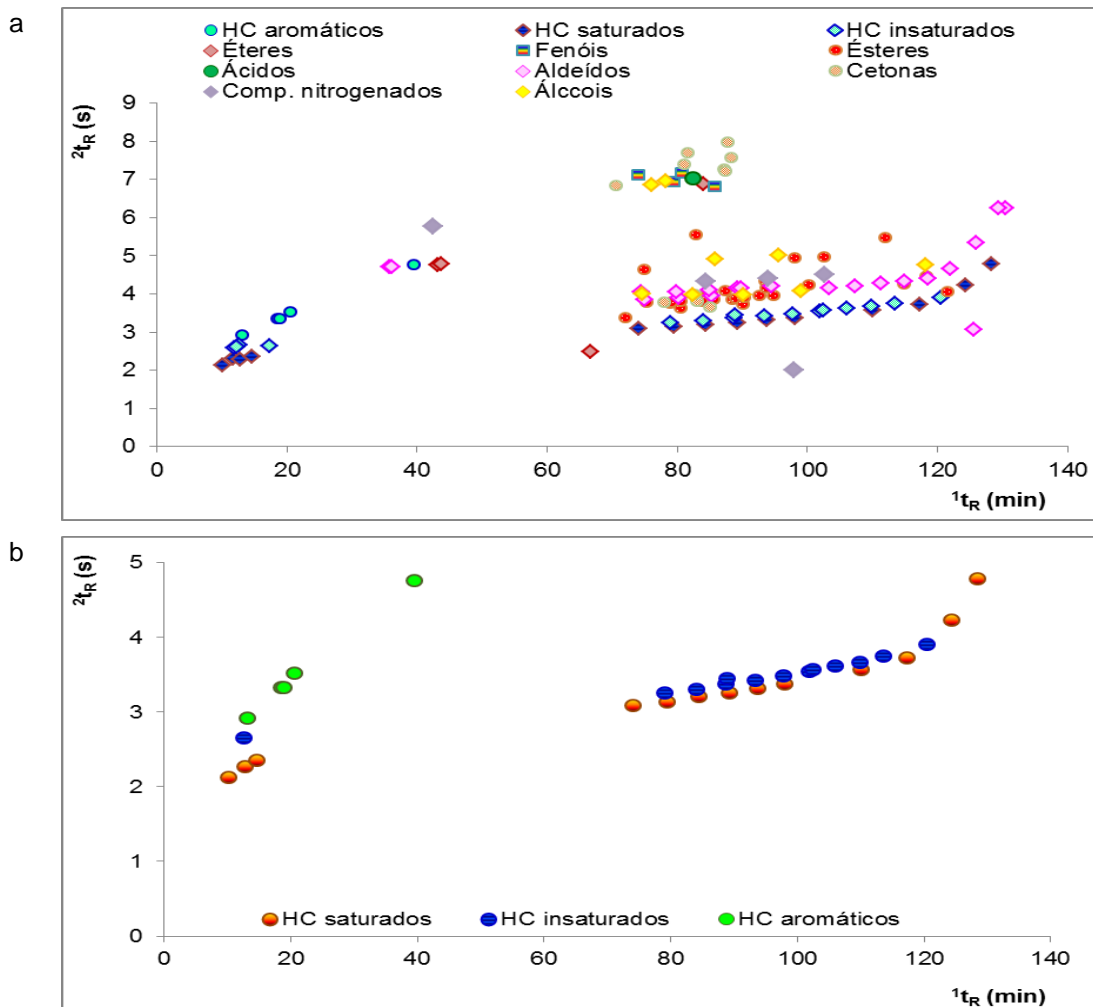


Figura 34: Gráficos de dispersão para as classes de compostos tentativamente identificados na fração F1+F2 do bio-óleo catalítico (BO BC CAT F1+F2). Em **a**) Todas as classes; **b**) Hidrocarbonetos aromáticos, saturados e insaturados; **c**) Benzenos, naftalenos, fluorenos, fenantrenos/antracenos, xantenos e pirenos. Em detalhe, a separação entre os fenantreno/antraceno e dihidro fenantreno/antraceno.

A **Figura 35** apresenta os gráficos de dispersão para as classes e as principais subclasses dos compostos tentativamente identificados nas frações BO BC F3. Esta fração apresentou menor quantidade de compostos aromáticos para todas as classes avaliadas. De acordo com os gráficos, os hidrocarbonetos saturados, insaturados e os aromáticos estão numa região de menor polaridade, enquanto compostos oxigenados alifáticos, como alguns aldeídos, álcoois e cetonas estão numa região de polaridade intermediária. Assim, observa-se uma boa separação de todos os hidrocarbonetos (saturados, insaturados, aromáticos) em relação aos aldeídos, cetonas e álcoois alifáticos, entretanto, estes últimos ocupam o mesmo espaço bidimensional. Apesar de todos os hidrocarbonetos estarem presentes numa região de menor polaridade, verifica-se uma separação entre estes, principalmente os saturados e insaturados em relação aos aromáticos. A separação entre os hidrocarbonetos saturados e insaturados pode ser melhor visualizada na **Figura 35b**. A distribuição dos compostos de maneira estrutural possibilita a identificação, por exemplo, de compostos saturados e insaturados dentro de uma classe, pois, a separação observada entre estes hidrocarbonetos, foi também verificada entre os ésteres e aldeídos, conforme detalhe pontilhado na **Figura 35c**.



Continua...

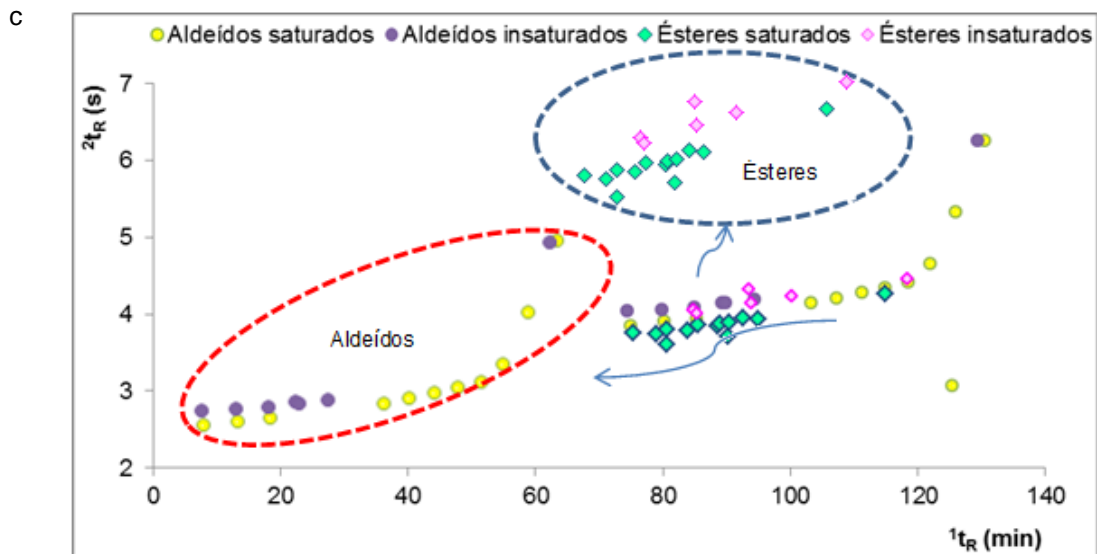


Figura 35: Gráficos de dispersão para as classes de compostos tentativamente identificados na fração F3 do bio-óleo não catalítico (BO BC). Em a) Todas as classes; b) Hidrocarbonetos aromáticos, saturados e insaturados; c) Aldeídos e ésteres saturados e insaturados.

A **Figura 36** apresenta a distribuição espacial dos compostos tentativamente identificados na fração BO BC CAT F3 e também a distribuição das principais subclasses. Nesta fração, ao contrário da fração equivalente para o bio-óleo não catalítico, a maioria das classes químicas apresenta uma quantidade maior de compostos aromáticos. Em relação à distribuição, grande parte dos compostos oxigenados ocupa a mesma região bidimensional. Os hidrocarbonetos saturados e insaturados, embora em menor quantidade, ocupam uma região do diagrama de cores de menor polaridade na 2D . Embora as cetonas e aldeídos de cadeia carbônica alifática estejam separados dos demais compostos numa região de menor polaridade, estão coeluinto entre si. A separação das cetonas de cadeia alifática das demais cetonas aromáticas pode ser visualizada na **Figura 36b**. Ainda em relação às cetonas, classe com maior número de compostos tentativamente identificados nesta fração, observa-se grande aromaticidade entre as subclasses, entretanto a separação entre estas é pequena em virtude da similaridade entre estas subclasses. Apesar da pequena separação, observa-se uma estruturação para as acetofenonas. Os fenóis, segunda classe com maior número de compostos tentativamente identificado, estão distribuídos em duas regiões no gráfico de dispersão (**Fig. 36c**). Os monoaromáticos estão na região entre 40 a 65 min na 1D e entre a 4 a 6 s na 2D , enquanto os biaromáticos (naftol) estão entre 68 min na 1D e entre 6 a 8 s na 2D , ou seja, completamente separados. Além do mais, a separação entre eles foi de acordo com o número de carbonos dos radicais ligados ao anel benzeno.

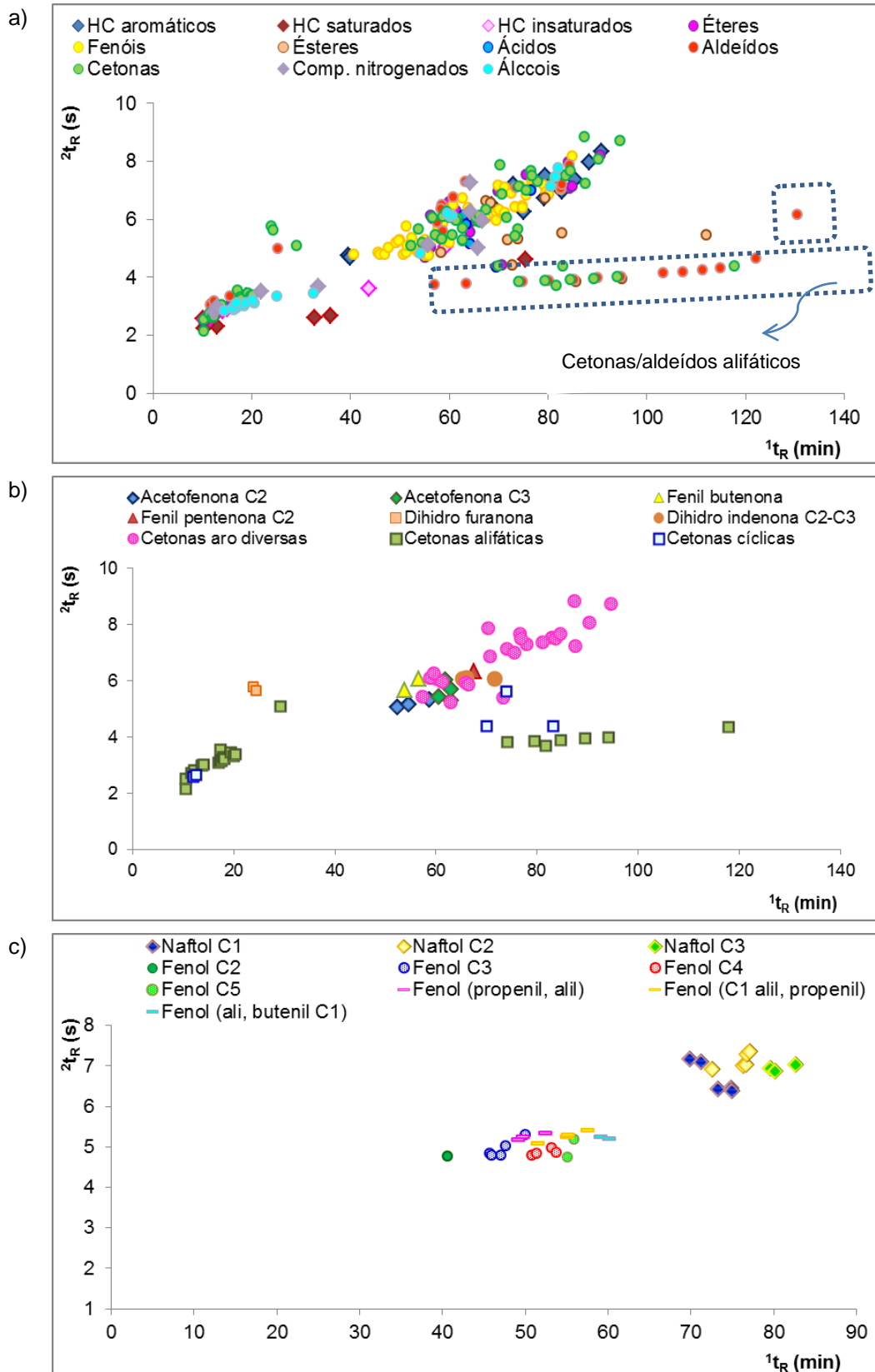


Figura 36: Gráficos de dispersão para as classes de compostos tentativamente identificados na fração F3 do bio-óleo não catalítico (BO BC CAT). Em **a)** Todas as classes; **b)** Subclasses das cetonas; **c)** Principais subclasses dos fenóis.

A **Figura 37** apresenta o gráfico de dispersão para as funções químicas tentativamente identificadas na fração BO BC F4+F5 e também para as principais subclasses desta fração. Enquanto a **Figura 38** apresenta os gráficos de dispersão para funções químicas da fração BO BC CAT F4+F5. Conforme as **Figuras 37a** e **38a**, o perfil de separação das duas frações foram similares. As principais classes químicas observadas nestas frações foram cetonas, fenóis e aldeídos.

Conforme a **Figura 37a**, não foi possível visualizar uma região específica para nenhuma classe de compostos identificados na fração BO BC F4+F5. Isso pode ser devido a grande quantidade de compostos oxigenados presente nesta fração em relação aos hidrocarbonetos (24 picos no total) e a similaridade entre algumas subclasses dessas funções. Os hidrocarbonetos identificados possuem pequeno peso molecular e estão na região de baixa polaridade entre 7 a 13 min na 1D , coelundo com outros compostos. De acordo com o gráfico de dispersão, foi possível visualizar uma separação somente dos ácidos carboxílicos e ésteres alifáticos em relação às demais classes. Em relação às cetonas, classe com maior número de compostos tentativamente identificados (**Fig. 37b**), observa-se que elas estão espalhadas por todo o gráfico de dispersão, em virtude da grande quantidade de subclasses presentes e das similaridades entre elas. Neste gráfico observa-se somente uma boa separação entre as cetonas alifáticas das demais subclasses de cetonas. Estas estão na região entre 8 a 20 min na 1D e 2 a 4 s na 2D . Ao contrário do observado para as cetonas, os fenóis apresentaram uma separação estruturada, pois estes foram separados de acordo com o número de carbonos dos radicais, conforme **Figura 37c**.

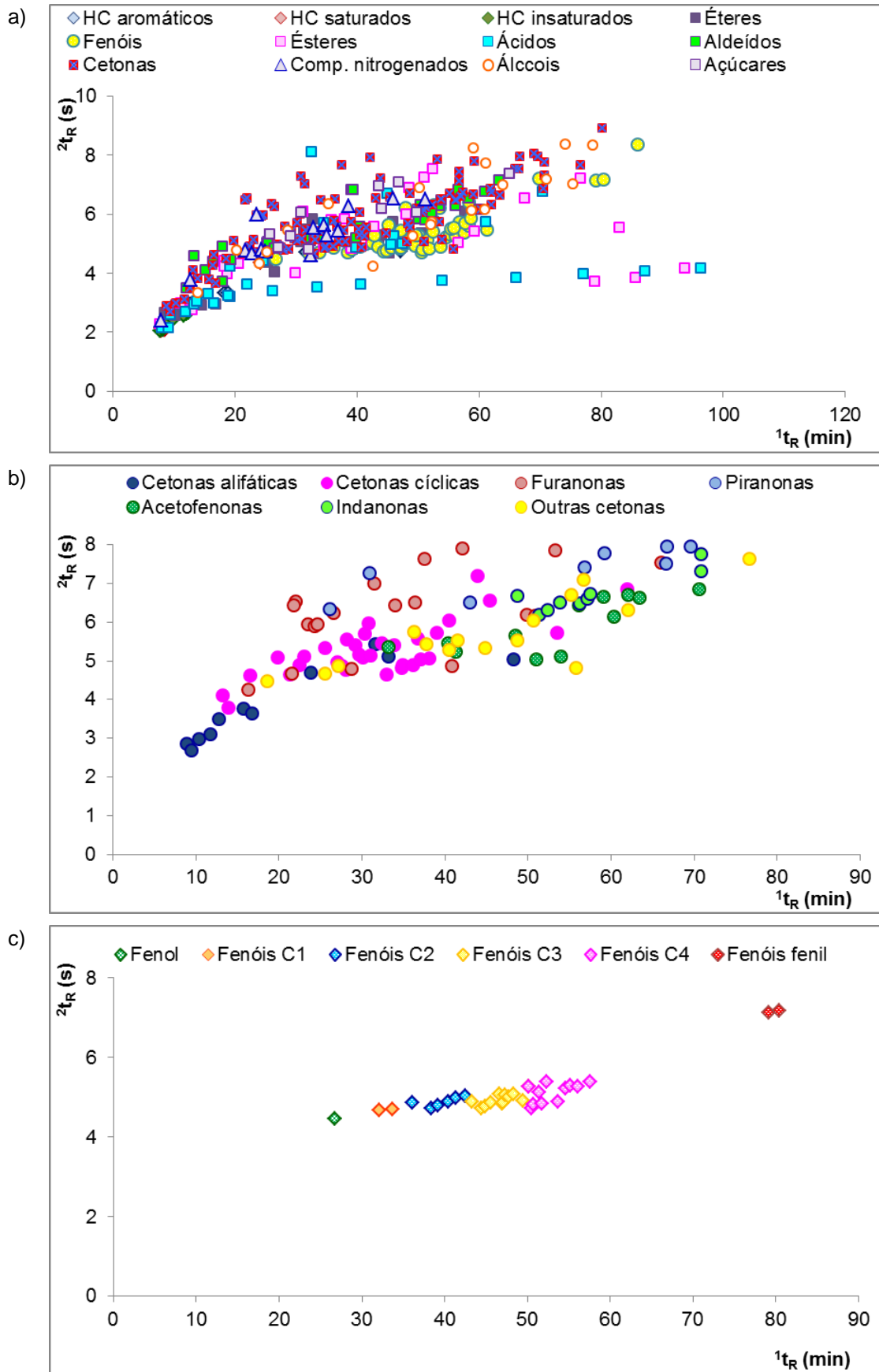
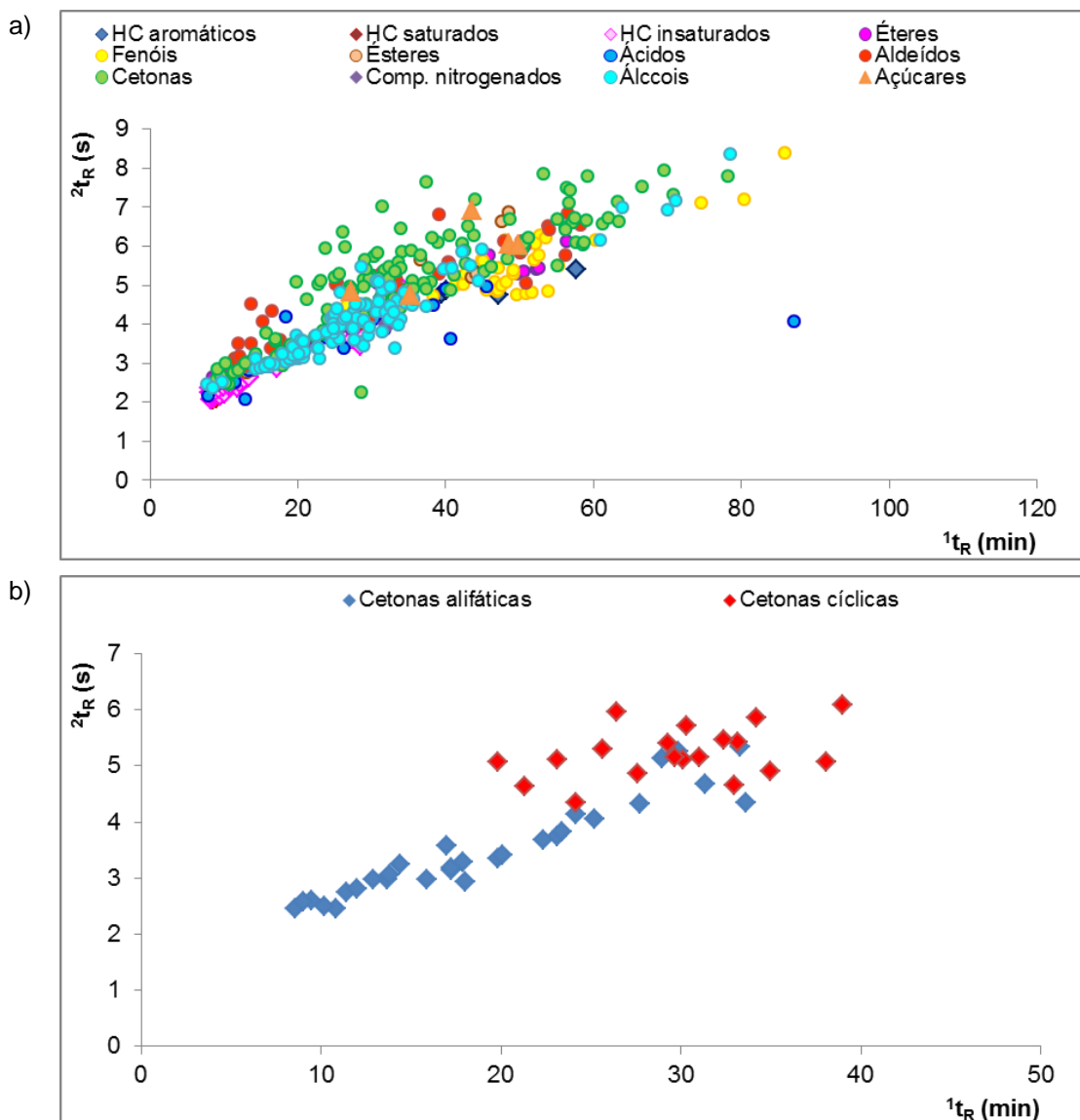


Figura 37: Gráficos de dispersão para as classes de compostos tentativamente identificados na fração F4+F5 do bio-óleo não catalítico (BO BC). Em **a)** Todas as classes; **b)** Cetonas; **c)** Principais subclasses dos fenóis.

A **Figura 38** apresenta a distribuição dos compostos para a fração BO BC CAT F4+F5 do bio-óleo catalítico. As cetonas não estão numa única região no gráfico de dispersão, entretanto o gráfico plotado entre as cetonas cíclicas e alifáticas, mostra uma separação entre estas duas subclasses, conforme **Figura 38b**. Segundo o gráfico de dispersão da **Figura 38a**, os fenóis e os álcoois estão distribuídos, principalmente, em duas distintas regiões. Os álcoois encontram-se entre 10 a 40 min na 1D e entre 2 a 6 s na 2D , enquanto os fenóis então entre 30 a 60 min na 1D e entre 4 a 7 s na 2D . Observa-se no gráfico de dispersão (**Fig. 38c**) uma separação entre os fenóis com uma hidroxila e com duas hidroxilas, além de uma separação de acordo com o número de carbonos do radical ligado ao anel aromático.



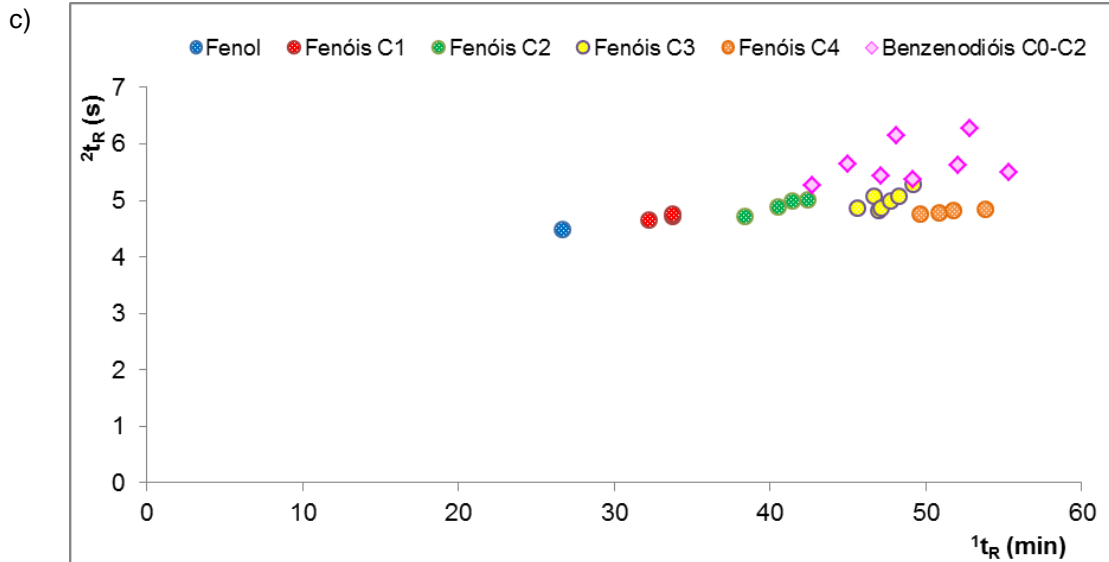
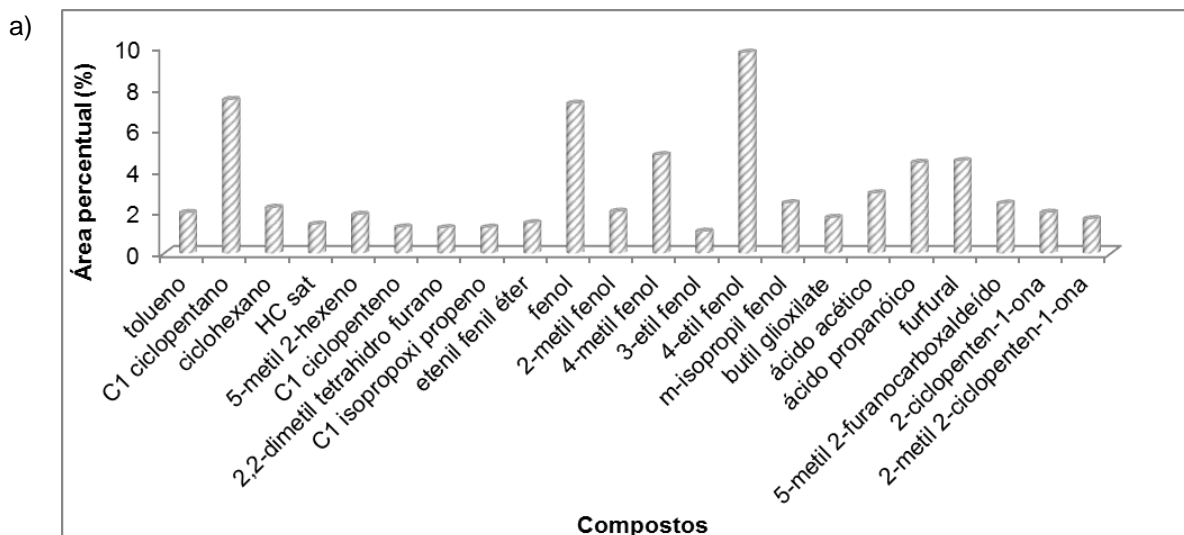


Figura 38: Gráficos de dispersão para as classes de compostos tentativamente identificados na fração F4+F5 do bio-óleo catalítico (BO BC CAT). Em a) Todas as classes; b) Cetonas cíclicas e alifáticas; c) Principais subclasses dos fenóis.

4.2.2.3 Análise semiquantitativa dos compostos majoritários do bio-óleo do bagaço de cana-de-açúcar catalítico e não catalítico e em suas frações

A **Figura 39** apresenta a distribuição dos compostos majoritários (área percentual maior que 1,0%) tentativamente identificados nos bio-óleos brutos obtidos a partir da pirólise catalítica e não catalítica do bagaço de cana-de-açúcar.



Continua...

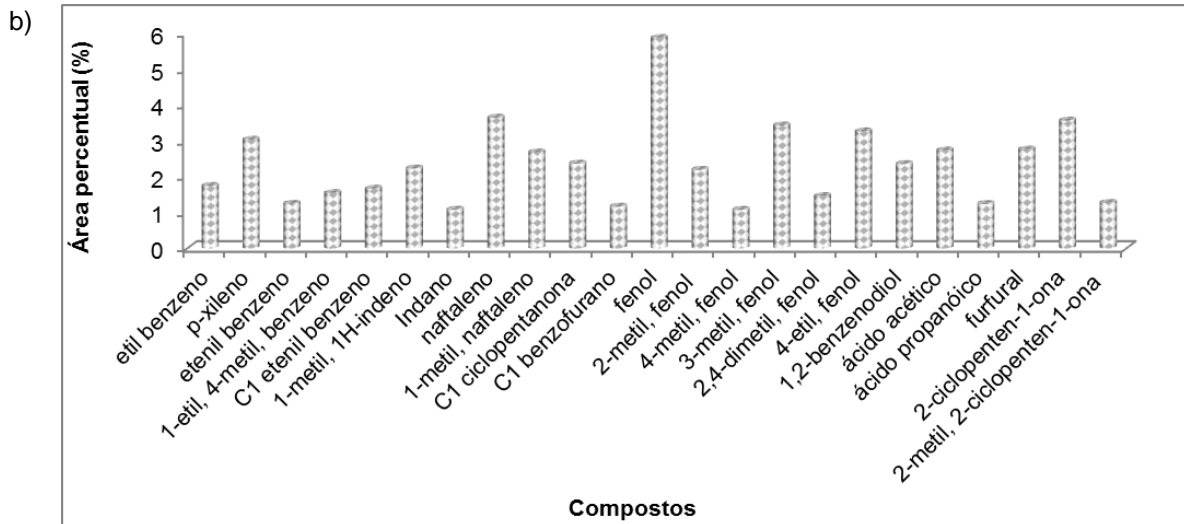


Figura 39 – Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (>1,0% em área) nos bio-óleos catalítico e não catalítico do bagaço de cana-de-açúcar. Em a) Bio-óleo bruto obtido a partir da pirólise não catalítica do bagaço da cana-de-açúcar (BO BC); Em b) Bio-óleo bruto obtido a partir da pirólise catalítica do bagaço da cana-de-açúcar (BO BC CAT).

No bio-óleo não catalítico foram tentativamente identificados 22 compostos com área percentual maior que 1% (**Fig. 39a**). Estes pertencem a seis distintas classes: hidrocarbonetos (6), éteres (3), fenóis (6), éster (1), ácidos carboxílicos (2), aldeídos (2) e cetonas (2). A soma da área destes compostos corresponde a 66,7%. Os compostos que mais contribuíram com essa área foram fenóis e hidrocarbonetos, respectivamente. A área referente aos fenóis foi de 27,2%, enquanto a dos hidrocarbonetos foi de 16,1%. Os três compostos majoritários foram 4-etil fenol (9,7%), C1 ciclopentano (7,4%) e fenol (7,2%). Dos 22 compostos majoritários, somente 7 deles não foram confirmados pelo índice de retenção.

No bio-óleo catalítico foram tentativamente identificados 23 compostos com área percentual maior que 1% (**Fig. 39b**), os quais também correspondem às seis classes identificadas para o bio-óleo não catalítico. A área percentual destes compostos foi de 53,5%, sendo que a soma das áreas dos hidrocarbonetos e fenóis foi de 40,8%. Em relação aos hidrocarbonetos, observa-se no bio-óleo catalítico uma quantidade maior destes com cadeia carbônica aromática quando comparado com o bio-óleo não catalítico. Isto refere-se à especificidade do catalisador ZSM-5 na pirólise. Os quatro compostos que mais contribuíram individualmente com área identificada foram: fenol (5,8%), naftaleno (3,6%) e 3-metil fenol (3,4%) e 2-ciclopenten-1ona (3,6%). O tempo de retenção confirmou 20 dos 23 compostos tentativamente identificados.

Em relação às frações obtidas com o fracionamento do bio-óleo não catalítico do bagaço da cana-de-açúcar, na fração F1+F2 foram tentativamente identificados 18 compostos com área percentual maior que 1% (**Fig. 40a**), sendo que 17 deles correspondem a hidrocarbonetos (60,4% em área) e 1 deles a éter (1,2% em área). Os três compostos que mais contribuíram foram: dois hidrocarbonetos insaturados de cadeia longa,

que, de acordo com os valores dos índices de retenção calculados, estes possuem entre 27 a 28 unidades de carbonos (11,5%) e 26 a 27 unidades de carbonos (6,5%), respectivamente e o tolueno (6,5%). O índice de retenção confirmou somente 7 compostos dos 18 tentativamente identificados.

Na fração F3 do bio-óleo não catalítico, foram tentativamente identificados 12 compostos majoritários que correspondem a 87,3% da área total identificada. Sendo que a área percentual do tolueno foi de 46,9%. Os demais compostos majoritários correspondem a ésteres (10,1% em área), aldeídos (26,4% em área) e nitrogenados (4,0%), conforme **Figura 40b**. Para esta fração foram confirmados somente 3 compostos com o índice de retenção.

Na fração obtida com os solventes mais polares, BO BC F4+F5, foram tentativamente identificados 19 compostos com área percentual maior que 1,0% (**Fig. 40c**). Estes compostos correspondem a hidrocarbonetos (8), fenóis (7), ácidos carboxílicos (2), éter (1) e aldeído (1). A área percentual destes compostos foi de 63,9%. Sendo os quatro principais majoritários: C1 ciclo pentano (8,5%), 4-etil fenol (7,8%), 1,2 benzenodiol (5,5%) e fenol (5,2%). Foram confirmados pelo índice de retenção 11 dos 19 compostos majoritários.

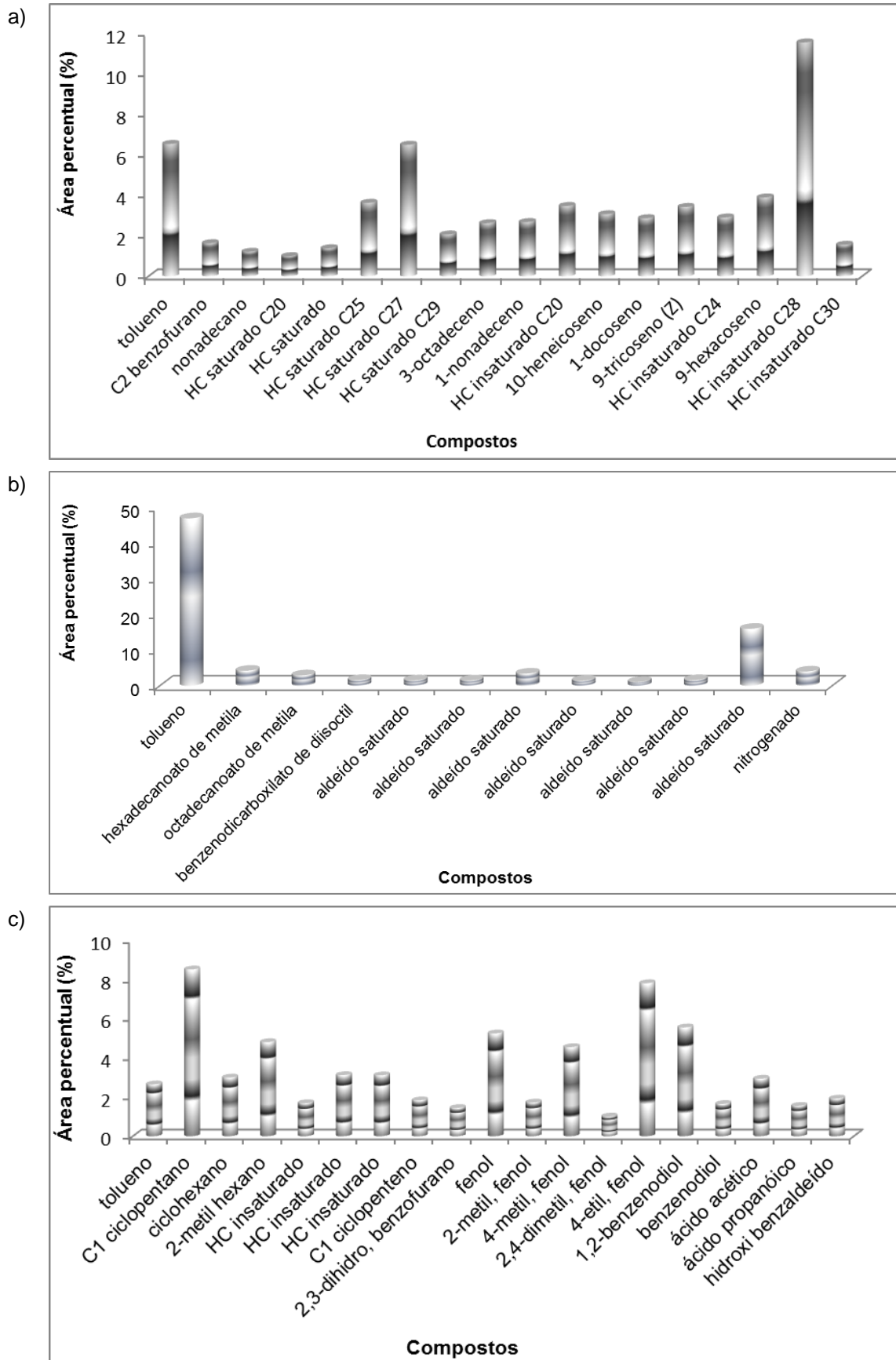
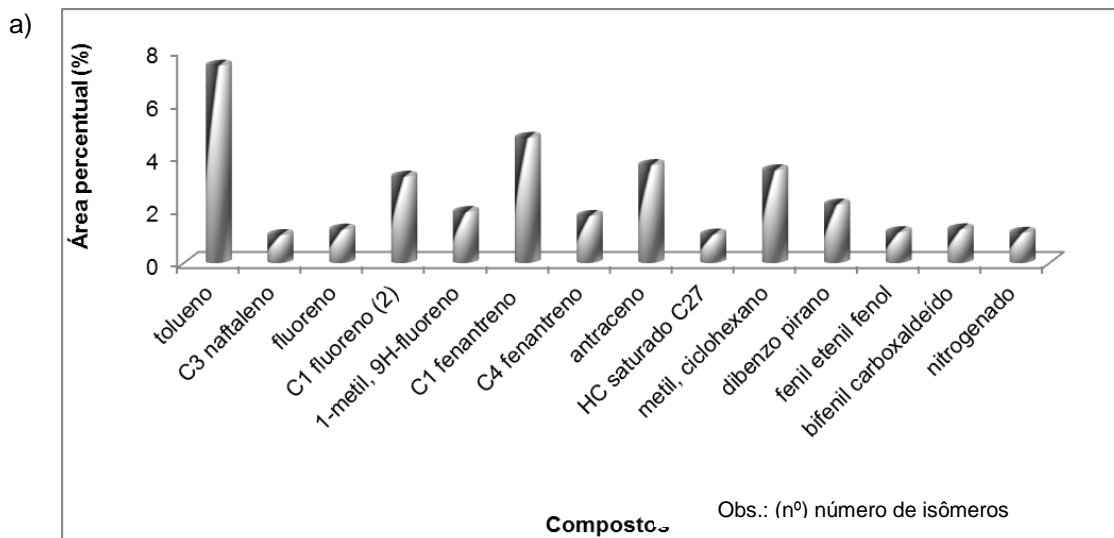


Figura 40 – Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (>1,0% em área) nas frações do bio-óleo não catalítico (BO BC). Em a) Fração BO BC F1+F2; b) Fração BO BC F3; c) Fração BO BC F4+F5.

A **Figura 41** apresenta a distribuição dos compostos majoritários das frações obtidas com o fracionamento do bio-óleo gerado a partir da pirólise catalítica do bagaço de cana-de-açúcar. Na fração BO BC CAT F1+F2 foram tentativamente identificados 15 compostos, considerando os isômeros (**Fig. 41a**). A área desses compostos corresponde a 35,3% do total identificada. A área dos hidrocarbonetos, classe com maior número de compostos majoritários, corresponde a 29,6%, os demais compostos referem-se éteres, fenóis, aldeídos e nitrogenados. O índice de retenção confirmou somente 5 compostos entre os majoritários tentativamente identificados nesta fração.

Na fração BO BC CAT F3 do bio-óleo catalítico foram tentativamente identificados 20 compostos com área percentual maior que 1,0%, considerando os isômeros (**Fig. 41b**). Esses compostos representam uma área de 43,3% do total tentativamente identificada e referem-se a cinco diferentes classes: hidrocarbonetos, fenóis, ésteres, cetonas e compostos nitrogenados. Os compostos que mais contribuíram com a área percentual identificada foram os fenóis, com 21,9% do total identificada, seguidos das cetonas com 9,2% e dos hidrocarbonetos cuja área foi de 8,1%. Os quatro compostos majoritários foram C1 naftalenol (7,2%), tolueno (6,2%), 2 isômeros C1 alil fenol (3,7%) e 2 isômeros C1 alil fenol (3,7%). O índice de retenção confirmou somente 6 compostos nesta fração.

Os compostos majoritários identificados na fração BO BC CAT F4+F5 do bio-óleo catalítico pertencem as seguintes funções químicas: hidrocarbonetos, fenóis, ésteres, ácidos carboxílicos e álcoois, sendo que a soma destes foi de 14 compostos. Esses compostos correspondem à área percentual de 39,6% do total identificada. Os três compostos majoritários identificados na fração correspondem a fenóis: 4-etil fenol (10,7% em área), fenol (6,3%) e 3-metil fenol (4,9%) (**Fig. 41c**). Entre os compostos majoritários identificados nesta fração o índice de retenção confirmou somente 7 compostos.



Continua...

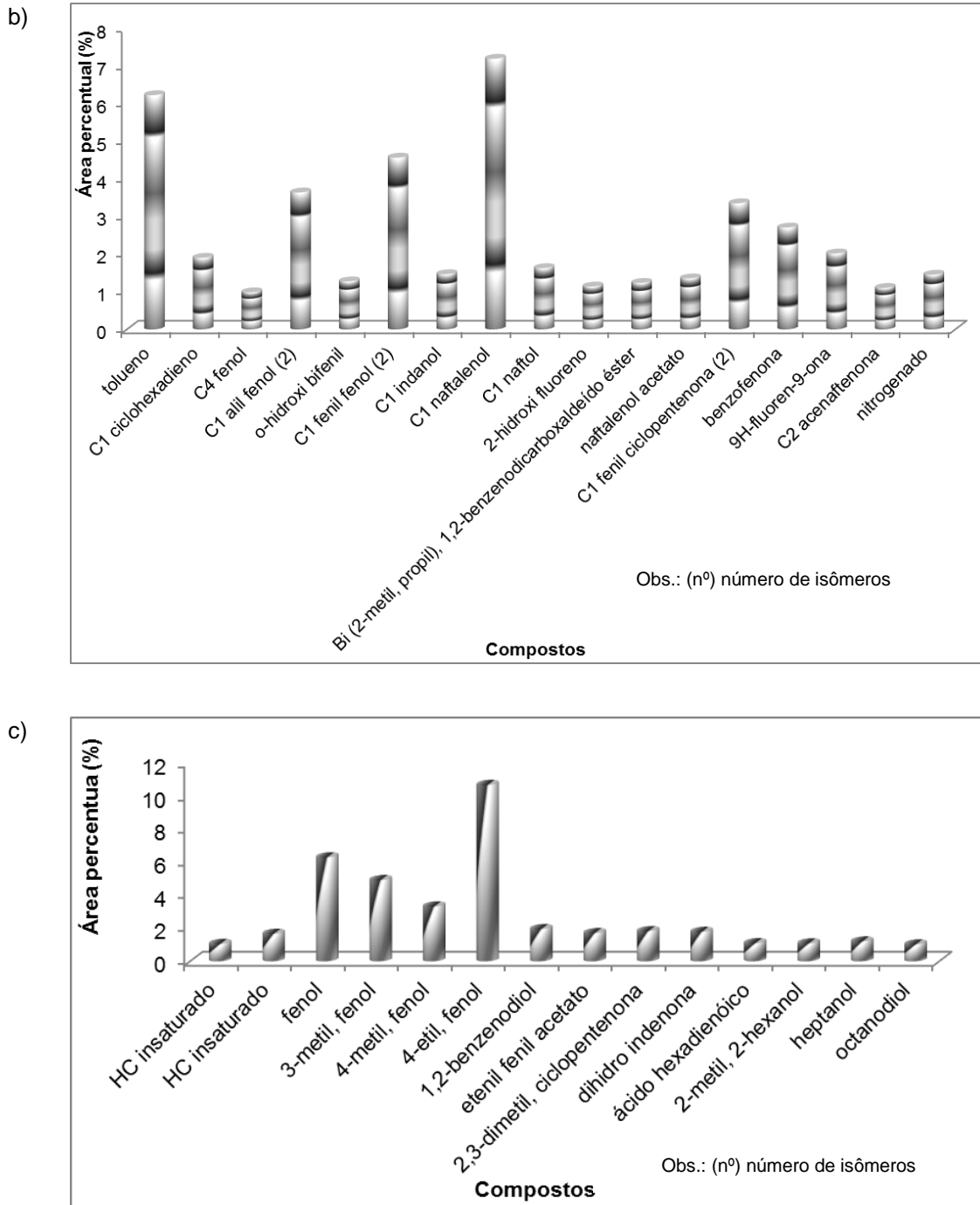


Figura 41 – Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (>1,0% em área) nas frações do bio-óleo catalítico (BO BC CAT). Em a) Fração BO BC CAT F1+F2; b) Fração BO BC CAT F3; c) Fração BO BC CAT F4+F5.

4.2.2.4 Análise dos extratos orgânicos das fases aquosas dos bio-óleos do bagaço de cana-de-açúcar catalítico e não catalítico

Os compostos orgânicos presentes nas fases aquosas dos bio-óleos catalítico e não catalítico do bagaço da cana-de-açúcar foram extraídos através da LLE. O perfil cromatográfico obtido via GC×GC/TOFMS para ambos os extratos pode ser visualizado na

Figura 42. Apesar do extrato da fase aquosa do bio-óleo catalítico apresentar uma quantidade maior de compostos quando comparado com o extrato da fase aquosa do bio-óleo não catalítico, a distribuição destes no espaço bidimensional foi muito similar.

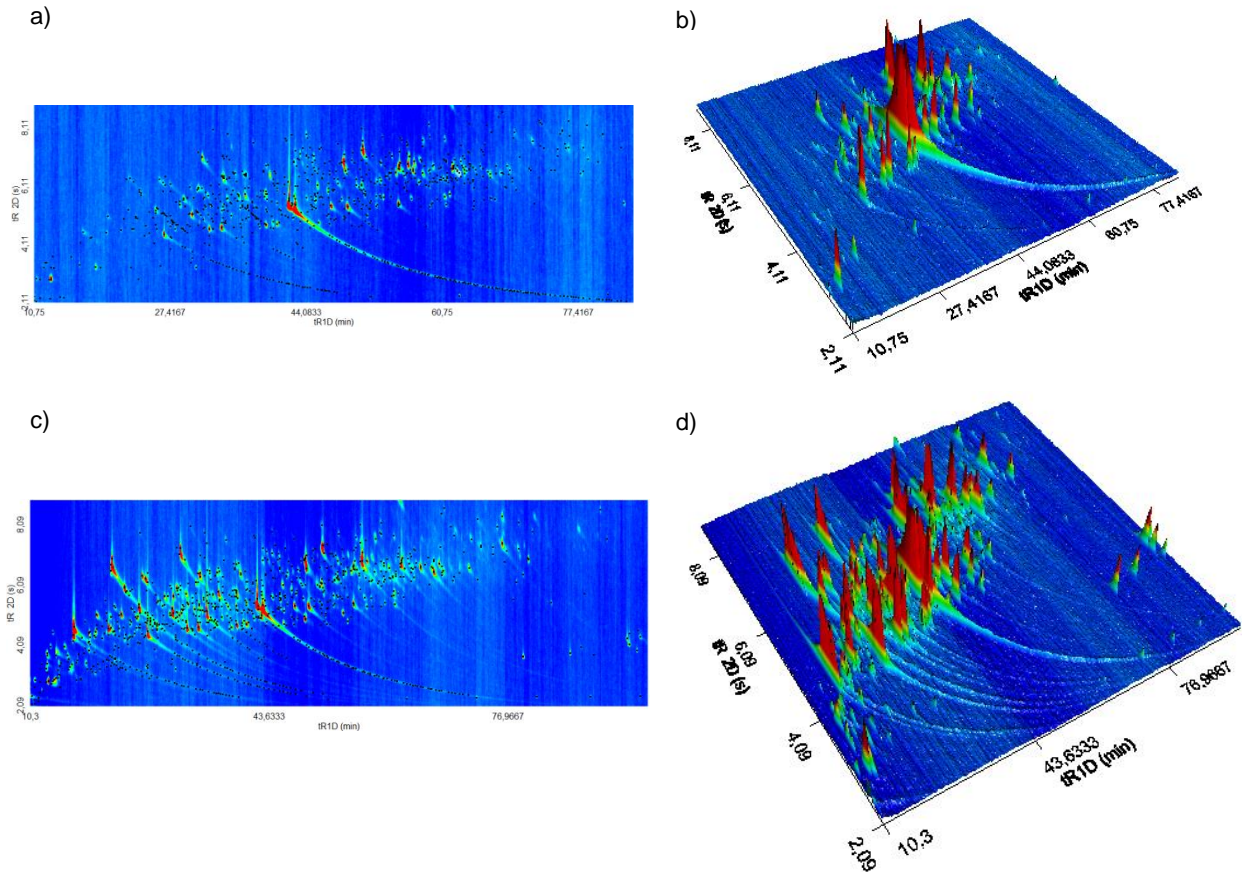


Figura 42: Diagramas de cores bidimensional e tridimensional obtidos via GCxGC/TOFMS para os compostos presentes nos extratos orgânicos da fase aquosa dos bio-óleos catalítico e não catalítico. Em a) Diagrama bidimensional para o extrato orgânico da fase aquosa do bio-óleo não catalítico (FA BC); b) Diagrama tridimensional para o extrato orgânico da fase aquosa do bio-óleo não catalítico (FA BC); c) Diagrama bidimensional para o extrato orgânico da fase aquosa do bio-óleo catalítico (FA BC CAT); d) Diagrama tridimensional para o extrato orgânico da fase aquosa do bio-óleo catalítico (FA BC CAT).

A **Figura 43** apresenta os gráficos de dispersão para os compostos tentativamente identificados nos extratos orgânicos das fases aquosas dos bio-óleos catalítico e não catalítico do bagaço da cana-de-açúcar.

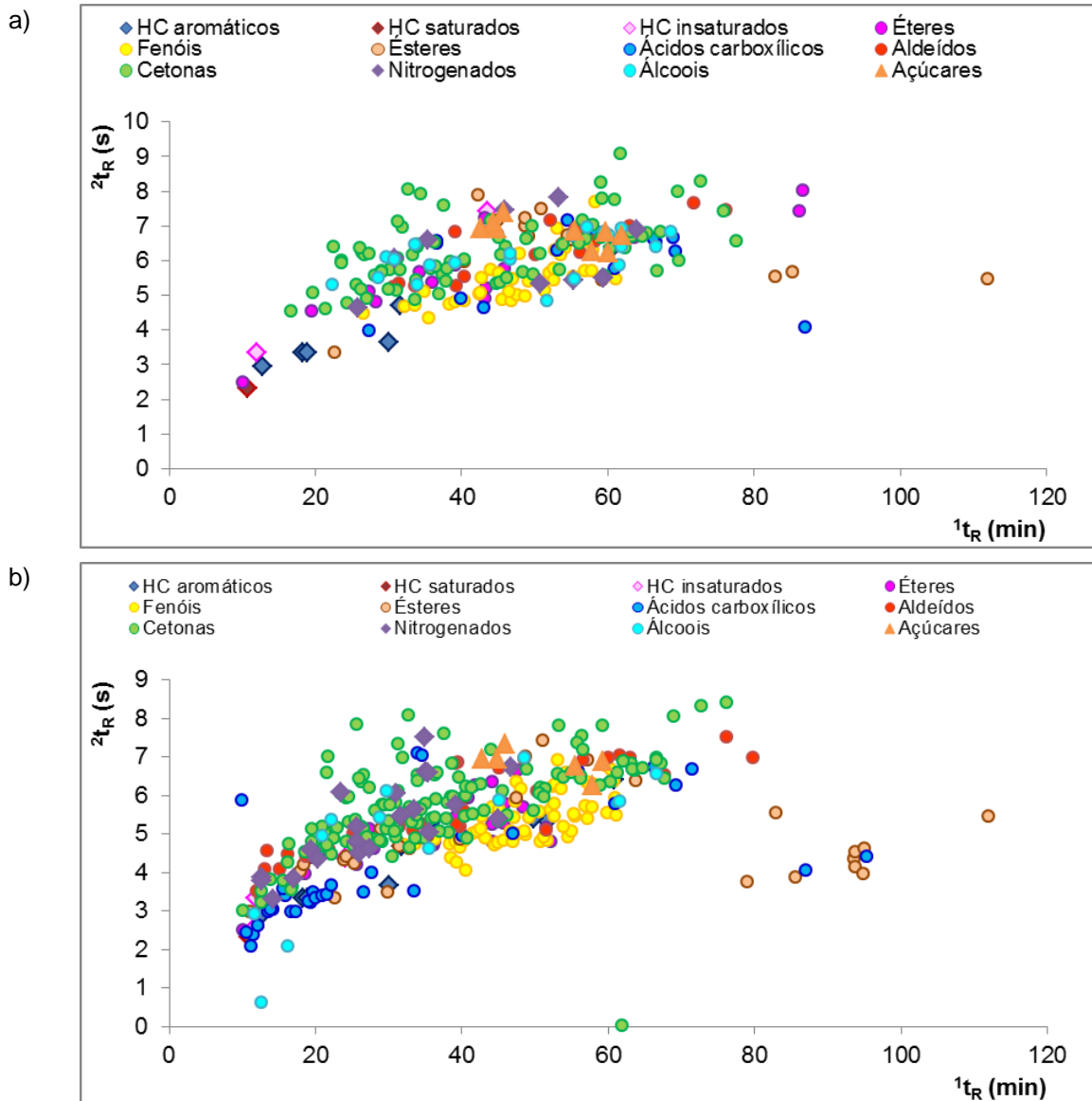


Figura 43: Gráficos de dispersão para os extratos orgânicos das fases aquosas dos bio-óleo obtidos a partir da pirólise catalisada e não catalisada do bagaço da cana-de-açúcar. Em a) Extrato da fase aquosa do bio-óleo não catalítico (FA BC); Em b) Extrato orgânico da fase aquosa do bio-óleo catalítico (FA BC CAT).

De acordo com a **Tabela XII** e com os gráficos de dispersão para os extratos de ambas as fases aquosas (**Fig. 43**), foram tentativamente identificados compostos referentes às 12 classes químicas avaliadas, com a predominância em número e área percentual de compostos oxigenados. De acordo com o gráfico de dispersão de ambos os extratos, ocorrem a sobreposições de compostos pertencentes a classes químicas distintas, entretanto, observa-se os fenóis, predominantemente, na região entre 30 a 60 min na 1^{D} e 4 a 7 s na 2^{D} . As cetonas estão distribuídas por todo o diagrama em ambos os extratos. No caso do extrato FA BC CAT, observa-se uma razoável separação dos ácidos carboxílicos em relação aos demais compostos, estes podem ser visualizados, principalmente na região de 10 a 35 min na 1^{D} e 2 a 4 s na 2^{D} .

No extrato orgânico FA BC, foram tentativamente identificados 232 compostos, que correspondem principalmente a cetonas (81) e fenóis (37) com área percentual de 17,5% e 37,9%, respectivamente. Apesar da identificação de hidrocarbonetos (9 picos), estes correspondem somente a 2,9% em área identificada. Os compostos derivados de açúcar também se destacam, correspondem a área de 8,9% (**Tabela XII e Fig. 44**). Neste extrato foram tentativamente identificados 21 compostos com área percentual maior que 1,0%, considerando os isômeros, que correspondem a 69,2% da área identificada. Estes compostos referem-se às seguintes funções químicas: fenol (8 picos), cetona (5 picos), açúcar (2 picos), aldeído (1 pico), ácido carboxílico (1 pico), álcool (1 pico), éster (2 picos) hidrocarboneto (1 pico). Os fenóis correspondem à área de 34,2%, sendo a área do 1,2 benzenodiol, principal composto majoritário, de 18,1% (**Fig. 45a**). O índice de retenção confirmou somente 69 compostos nesta fração. Entre os majoritários, foram confirmados 13 compostos dos 21 tentativamente identificados.

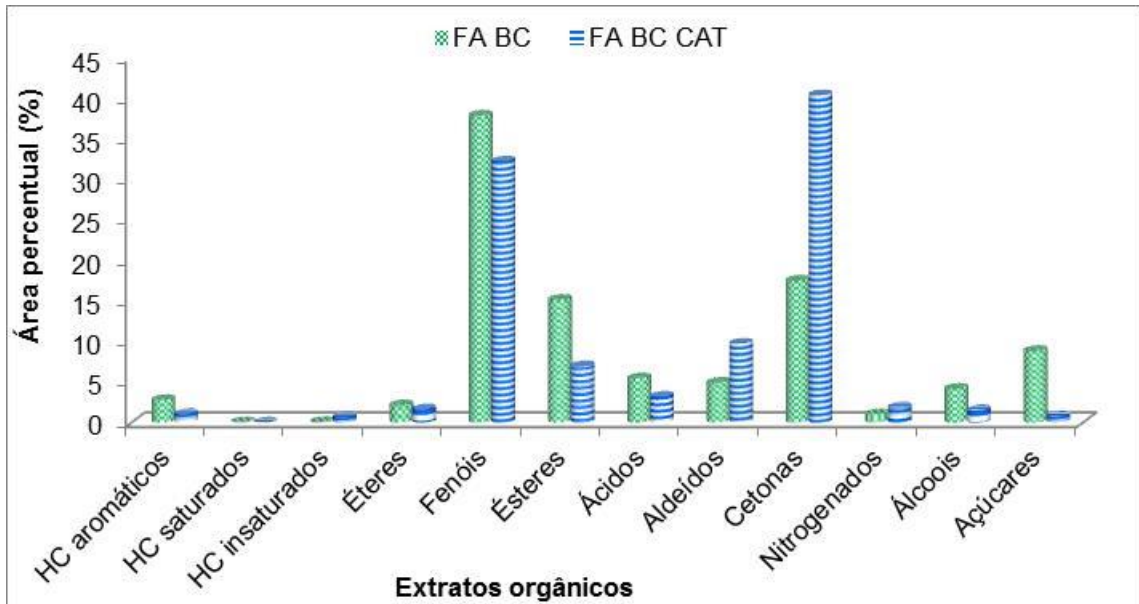


Figura 44: Distribuição da área percentual dos compostos tentativamente identificados nos extratos orgânicos das fases aquosas dos bio-óleos catalítico e não catalítico do bagaço da cana-de-açúcar.

No extrato orgânico da fase aquosa do bio-óleo catalítico foram tentativamente identificados 378 compostos, correspondendo a cetonas (133 picos) e fenóis (65 picos), sendo a soma da área percentual destes compostos de 72,6% do total identificada. Entretanto para esta amostra, a área percentual para as cetonas foi maior que para os fenóis, 40,4% e 32,2%, respectivamente, ao contrário do observado para o extrato FA BC. Outra diferença deste extrato em relação ao extrato da fase aquosa do bio-óleo não catalítico refere-se ao menor percentual em área dos açúcares, ácidos carboxílicos e ésteres. Os compostos majoritários identificados nesta fração pertencem às seguintes

funções: fenol (8 picos), éster (2 picos), aldeído (2 picos), e cetona (10), que correspondem à área de 60,7% do total identificada para esta fração. Os fenóis e as cetonas são os compostos que mais contribuíram com a área percentual neste extrato, 24,6 % e 25,0%, respectivamente. Os três compostos majoritários foram o 1,2 benzenodiol (6,6%), 2-ciclopenten-1-ona (6,1%) e 2(5H)-furanona (5,1%) (**Fig. 45b**). Foi possível confirmar com o índice de retenção, 156 compostos cuja área percentual corresponde a 72,3% do total identificada. Entre os compostos majoritários, o índice de retenção confirmou 18 compostos dos 22 tentativamente identificados.

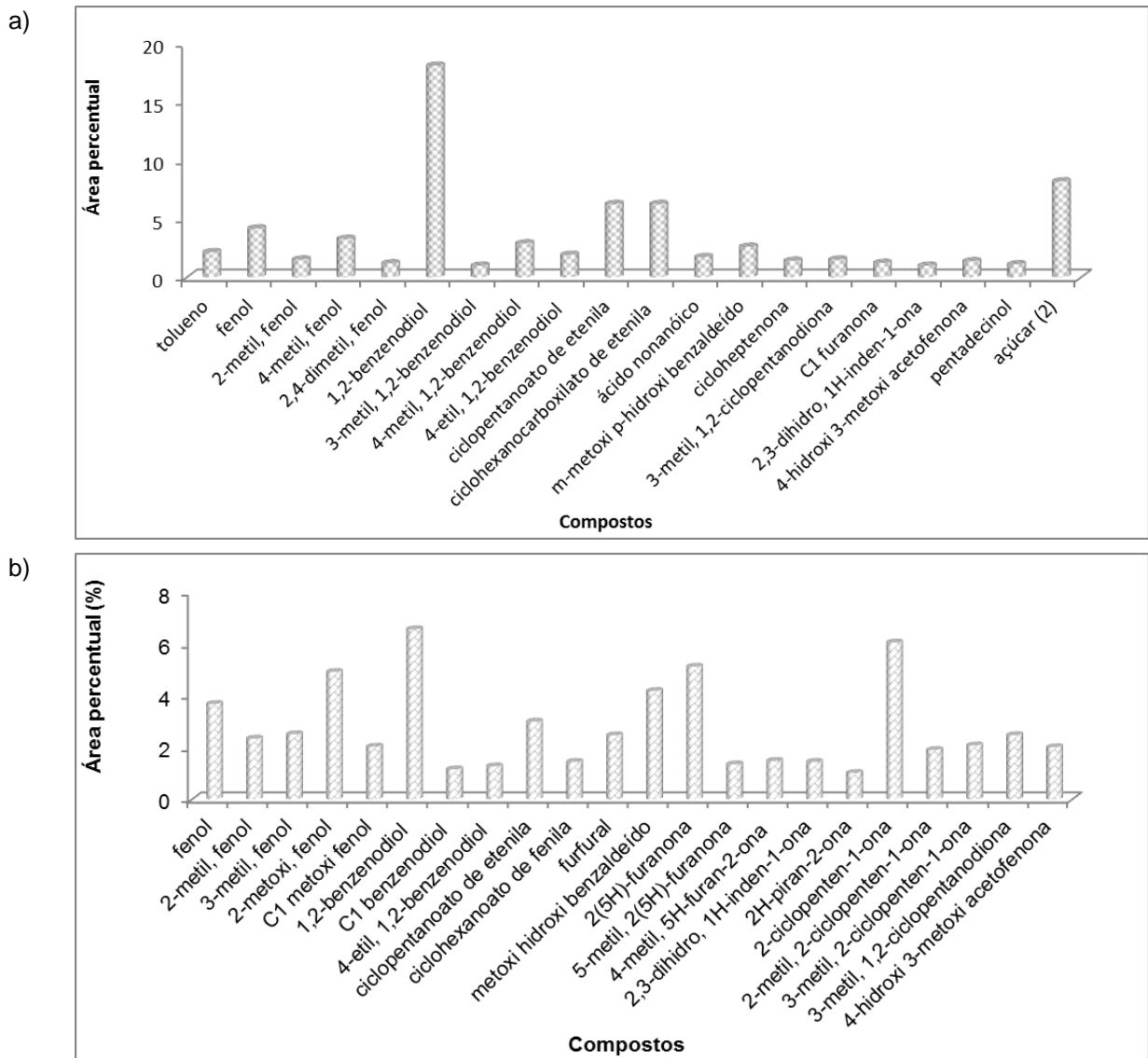


Figura 45 – Distribuição semiquantitativa dos compostos majoritários (>1,0% em área) nos extratos orgânicos obtidos por LLE das fases aquosas dos bio-óleos do bagaço de cana-de-açúcar. Em a) Extrato para fase aquosa do bio-óleo não catalítico (FA BC); b) Extrato para fase aquosa do bio-óleo catalítico (FA BC CAT).

Tabela XII: Número de picos tentativamente identificados (totais e por IR), percentual de picos (totais e por IR) e percentual em área (totais e por IR), para os extratos orgânicos das fases aquosas dos bio-óleos catalítico e não catalítico do bagaço de cana-de-açúcar, analisados por GCxGC/TOFMS.

Classe	Identificação Total						Identificação LTPRI					
	Picos		Picos (%)		Área (%)		Picos		Picos (%)		Área (%)	
	FA BC	FA BC CAT	FA BC	FA BC CAT	FA BC	FA BC CAT	FA BC	FA BC CAT	FA BC	FA BC CAT	FA BC	FA BC CAT
HC												
aromáticos	6	9	2,59	2,38	2,78	1,05	5	6	7,25	3,85	2,59	0,88
HC saturados	1	1	0,43	0,26	0,04	0,02	1	0	1,45	0,00	0,04	0,00
HC												
insaturados	2	6	0,86	1,59	0,07	0,63	0	0	0,00	0,00	0,00	0,00
Éteres	15	25	6,47	6,61	2,15	1,63	2	8	2,90	5,13	0,12	0,54
Fenóis	37	65	15,95	17,20	37,86	32,22	21	32	30,43	20,51	35,91	26,08
Ésteres	14	33	6,03	8,73	15,14	6,96	4	17	5,80	10,90	0,21	1,30
Ácidos	16	35	6,90	9,26	5,46	3,20	5	16	7,25	10,26	1,65	1,93
Aldeídos	18	32	7,76	8,47	4,92	9,76	5	19	7,25	12,18	2,97	8,46
Cetonas	81	133	34,91	35,19	17,53	40,39	25	56	36,23	35,90	6,98	33,15
Nitrogenados	9	21	3,88	5,56	1,02	1,87	0	1	0,00	0,64	0,00	0,00
Álcoois	24	12	10,34	3,17	4,17	1,50	1	1	1,45	0,64	0,07	0,00
Açúcares	9	6	3,88	1,59	8,86	0,76	0	0	0,00	0,00	0,00	0,00
TOTAL	232	378	100,00	100,00	100,00	100,00	69	156	100,00	100,00	50,53	72,33

Em comparação com os extratos orgânicos da fase aquosa do bio-óleo de serragem, ambos apresentam uma grande quantidade de compostos oxigenados e uma pequena quantidade de hidrocarbonetos.

Os resultados obtidos com a análise dos extratos orgânicos das fases aquosas de todos os bio-óleos avaliados neste trabalho (bio-óleo de serragem e de bagaço de cana-de-açúcar catalítico e não catalítico) demonstraram a importância do estudo da mesma, uma vez que muitos destes compostos, como fenóis e algumas cetonas possuem grande valor agregado, e desta maneira, poderiam ser extraídos da fase aquosa e serem utilizados como fonte de matéria-prima para a indústria.

4.3 Resumo dos Principais Resultados

As **Figuras 46 e 47** apresentam gráficos de dispersão com a distribuição das classes de compostos identificados e das áreas percentuais desses compostos referentes a todas as amostras provenientes do bio-óleo de serragem (bio-óleo bruto, suas frações e os extratos orgânicos da sua fase aquosa), enquanto as **Figuras 48 e 49** apresentam os gráficos para todas as amostras geradas a partir dos bio-óleos (catalisado e não catalisado) do bagaço da cana-de-açúcar (bio-óleo bruto, suas frações e os extratos orgânicos da sua fase aquosa).

Em relação às amostras derivadas do bio-óleo de serragem, observa-se que os extratos SPE e LLE da fase aquosa apresentam, praticamente, os mesmos compostos identificados no bio-óleo bruto, com exceção somente dos nitrogenados, demonstrando a riqueza de compostos presentes na fase aquosa do bio-óleo. O fracionamento em coluna aberta realizado no bio-óleo foi muito eficiente, pois diminui a complexidade do bio-óleo, concentrou alguns compostos e obteve-se uma separação de compostos de acordo com suas polaridades. Compostos mais apolares, como os hidrocarbonetos, estão presentes em grande quantidade e com grande área percentual nas frações BO SE F1 e BO SE F2, enquanto os mais polares, como cetonas e fenóis, estão presentes em grande quantidade nas frações mais polares como a BOF4 e BOF5 (**Fig. 46 e 47**).

Os resultados obtidos para as amostras provenientes dos bio-óleos do bagaço da cana-de-açúcar (catalisado e não catalisado) foram semelhantes aos gerados das amostras oriundas da pirólise da serragem. Nos extratos orgânicos das fases aquosas dos bio-óleos catalisado e não catalisado observou-se também uma grande quantidade de compostos oxigenados de polaridade mais elevada, principalmente fenóis e cetonas. A riqueza de compostos oxigenados, como fenóis e cetonas em fases aquosas de bio-óleos de diferentes biomassas representa um excelente resultado, pois demonstra a diminuição destes na composição do bio-óleo e representa uma alternativa como fonte para a obtenção dos

mesmos. Da mesma forma que o fracionamento do bio-óleo de serragem, o realizado com os bio-óleos do bagaço de cana-de-açúcar apresentou bons resultados, pois também observou-se a separação de classes de compostos presentes nos bio-óleos de acordo com a polaridade dos mesmos, ou seja, nas primeiras frações, grande quantidade de compostos mais apolares (hidrocarbonetos) e pequena quantidade de compostos mais polares, enquanto as frações eluídas com solventes mais polares apresentaram grande quantidade de compostos oxigenados, principalmente fenóis e cetonas e uma pequena quantidade de hidrocarbonetos (**Fig. 48 e 49**).

Em relação ao uso do catalisador ZSM-5 no processo da pirólise do bagaço a cana-de-açúcar, este apresentou resultados promissores na conversão de compostos oxigenados em hidrocarbonetos, com o intuito de produção de bio-óleo para o uso deste como combustível ou como fonte de matéria-prima para a produção de compostos, como aditivos de combustíveis derivados do petróleo.

Os bio-óleos analisados neste trabalho apresentaram grande variedade de classes químicas, entretanto as majoritárias em ambos os bio-óleos correspondem a hidrocarbonetos, fenóis e cetonas, conforme **Figura 50**. A soma das áreas percentuais dessas classes de compostos foi de 66%, 70% e 81% nos bio-óleos BO SE, BO BG e BO GC CAT, respectivamente. Entre esses três bio-óleos, o BO SE apresentou o menor teor de hidrocarbonetos, em torno de 8%, enquanto o BO BG CAT apresentou o maior teor, em torno de 37%, evidenciando a ação do catalisador ZSM-5 na conversão em compostos oxigenados em hidrocarbonetos. Em relação às respectivas fases aquosas desses bio-óleos (FA SE LLE, FA SE SPE, FA BG, FA BG CAT), a soma das áreas percentuais para essas classes foram de 91% e 93% para os extratos FA SE LLE, FA SE SPE, respectivamente, sendo a distribuição desses compostos para ambas as técnicas de extração muito parecidas. Para os extratos FA BG, FA BG CAT a soma das áreas percentuais dessas classes foram de 58% e 74%, respectivamente (**Fig. 50**).

Muitos dos compostos identificados nas amostras analisadas neste trabalho possuem grande importância industrial, sendo assim, estas amostras representam uma alternativa para fontes de matéria-prima para a indústria. Os benzenodióis, tal como a hidroquinona e catecol, presentes em grande quantidade nos bio-óleos e também nos extratos orgânicos das fases aquosas destes, podem ser utilizados como antioxidantes na produção de borrachas, como antivirais, como clareadores de pele de uso tópico e no estudo com enzimas, pois ele afeta a atividade enzimática.^{195, 196} Aproximadamente 50% do catecol sintético são usados na produção de pesticida, o restante tem sido usado como precursor de produtos de química fina, como perfumes e fármacos.¹⁹⁷⁻⁻¹⁹⁹ No presente trabalho, o catecol, que foi confirmado pelo índice de retenção nas amostras provenientes dos bio-óleos do bagaço de cana-de-açúcar, possui uma área percentual de 2,3% no bio-

óleo bruto catalisado, 18,1% no extrato orgânico da fase aquosa do bio-óleo não catalisado e 6,6% no extrato da fase aquosa do bio-óleo catalisado. Na fase aquosa do bio-óleo de serragem, onde não foi calculado o índice de retenção dos compostos, a área dos benzenodióis foi entre 33,9% a 45,8%. Outro composto de grande importância industrial é o guaiacol e seus derivados, que são conhecidos a mais de um século e podem ser usados como antissépticos, fungicidas, sedativos gástricos e aromatizantes.^{200,201} Os fenóis e derivados também são muito utilizados para a obtenção de resinas fenólicas.¹⁴

A grande quantidade de fenol e derivados presentes no bio-óleo é interessante do ponto de vista industrial: os fenóis isolados a partir do bio-óleo representam uma alternativa para a substituição da principal fonte usada para obtê-los, o petróleo. O uso direto do bio-óleo contendo grande quantidade de fenóis poderá facilitar a síntese de resinas sintéticas devido à elevada reatividade, em comparação com outros compostos fenólicos alquilados ou metoxilados.²⁰²

As cetonas, outra classe majoritária presente nos bio-óleos analisados, pode ser utilizada na síntese química. Compostos como furanonas possuem aplicação como precursores na síntese de fungicidas. As furanonas bromadas possuem ação antibacteriana e podem ser usadas como revestimentos de utensílios e dispositivos na área médica.²⁰³ As furanonas também podem ser utilizadas como agentes inibidores de sementes.¹⁸⁷ Atualmente, as furanonas são extraídas de algas marinhas.^{203, 204}

Os hidrocarbonetos aromáticos, especialmente benzeno, tolueno e xilenos (BTX), são compostos químicos muito versáteis que podem ser utilizados como componentes da gasolina, solventes e na síntese de vários produtos como detergentes, plásticos e fibras sintéticas.^{188,189} Atualmente estes compostos são obtidos a partir do petróleo. O bio-óleo também pode ser usado como fonte de combustível se for obtido em condições que favoreçam a geração de bio-óleo com menor teor de compostos oxigenados, como por exemplo, uma pirólise com uso de catalisador.

Tendo em vista a grande importância industrial de muitos compostos encontrados nos bio-óleos, os resultados deste trabalho trazem informações importantes para a avaliação da composição dos bio-óleos obtidos a partir de resíduos agrícolas (serragem e bagaço da cana-de-açúcar) e, desta forma poder decidir a melhor aplicação do bio-óleo obtido.

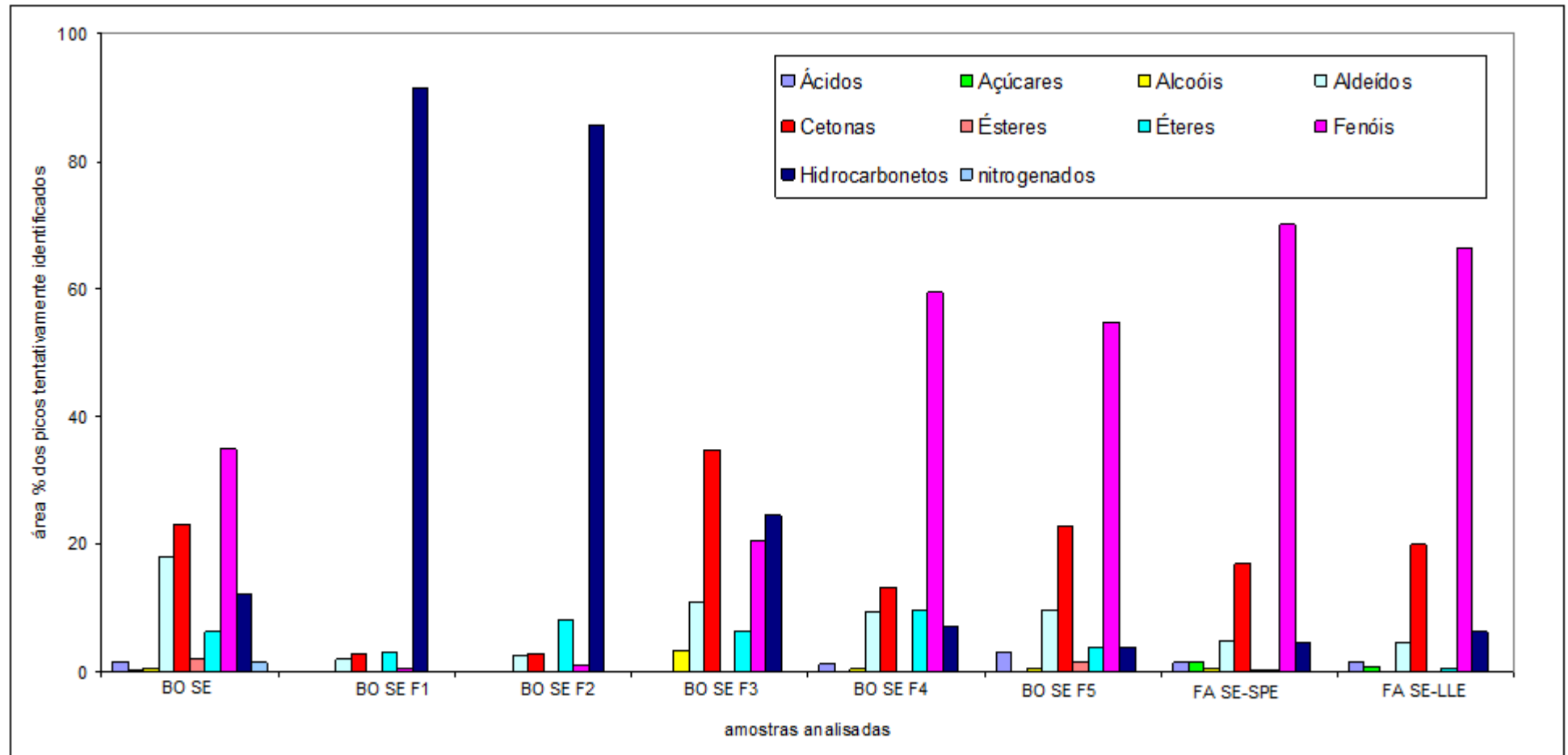


Figura 46: Distribuição da área percentual dos compostos tentativamente identificados no bio-óleo, suas frações obtidas com o fracionamento e nos extratos SPE e LLE da fase aquosa do bio-óleo de serragem.

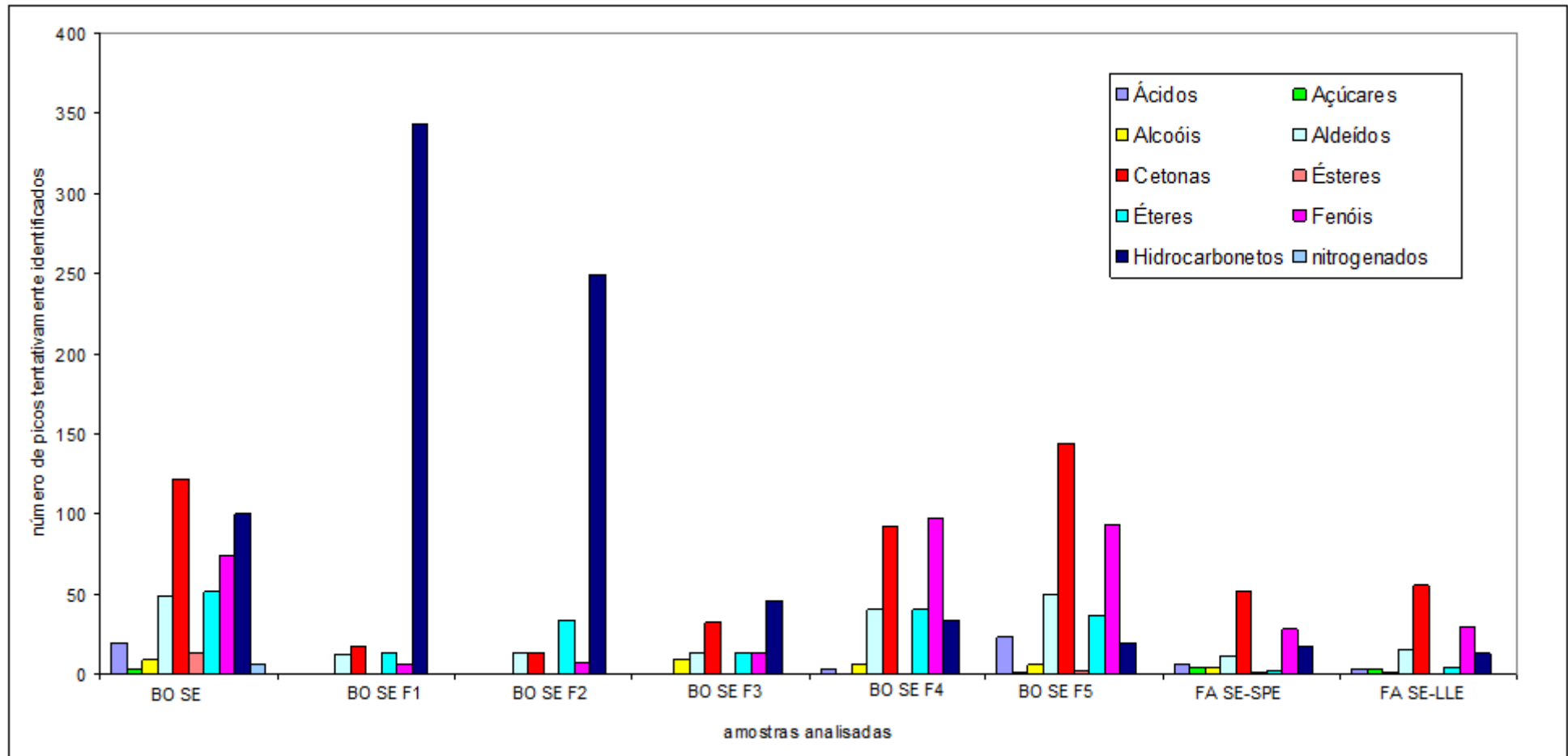


Figura 47: Distribuição do número de compostos tentativamente identificados no bio-óleo, nas suas frações obtidas com o fracionamento e nos extratos SPE e LLE da fase aquosa do bio-óleo de serragem.

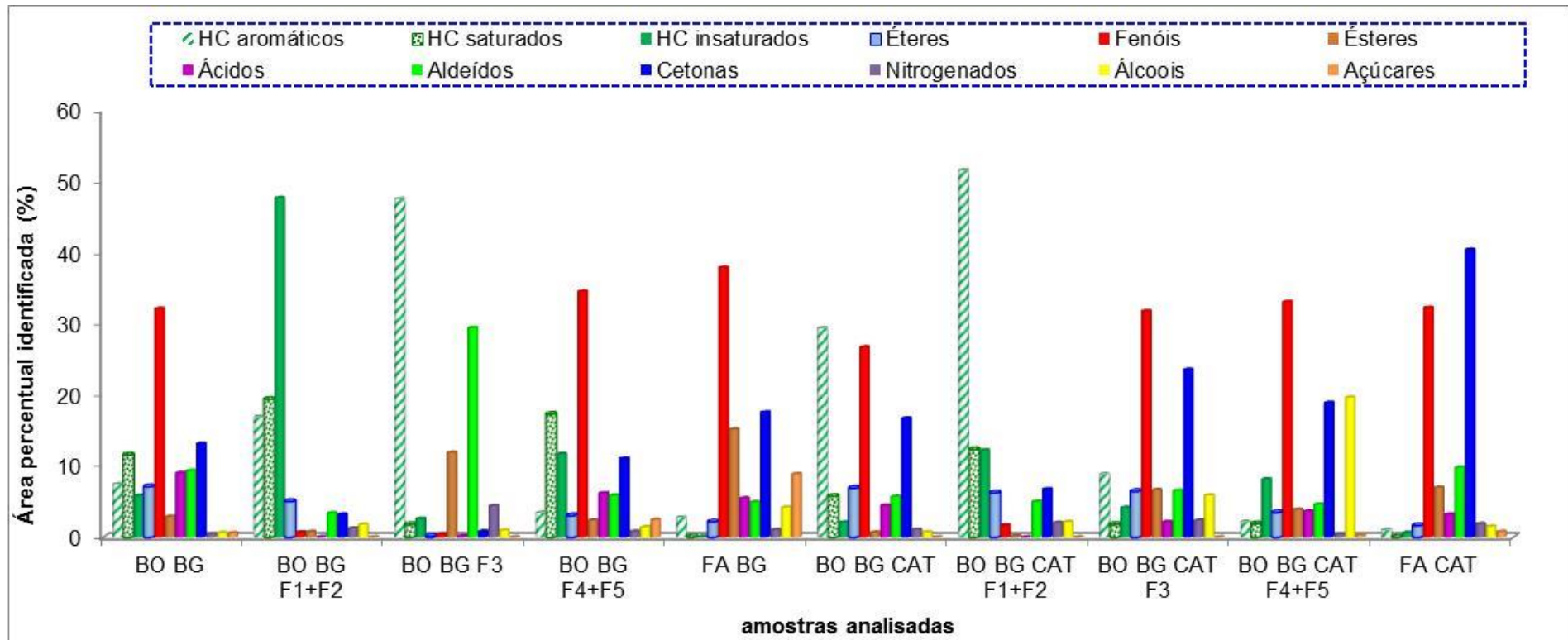


Figura 48: Distribuição da área percentual dos compostos tentativamente identificados nos bio-óleos, nas suas frações obtidas com o fracionamento e nos extratos LLE das fases aquosas dos bio-óleos catalítico e não catalítico de bagaço de cana-de-açúcar.

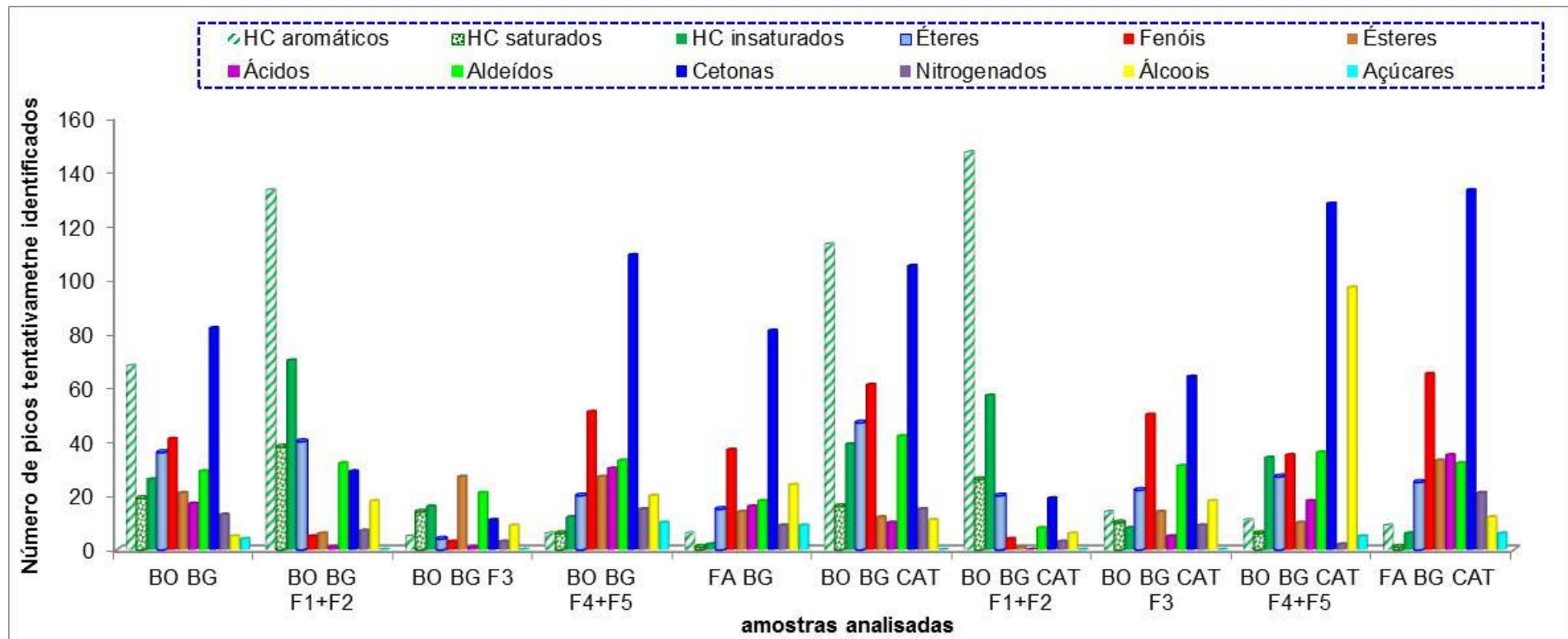


Figura 49: Distribuição do número de compostos tentativamente identificados nos bio-óleos, nas suas frações obtidas com o fracionamento e nos extratos LLE das fases aquosas dos bio-óleos catalítico e não catalítico de bagaço de cana-de-açúcar.

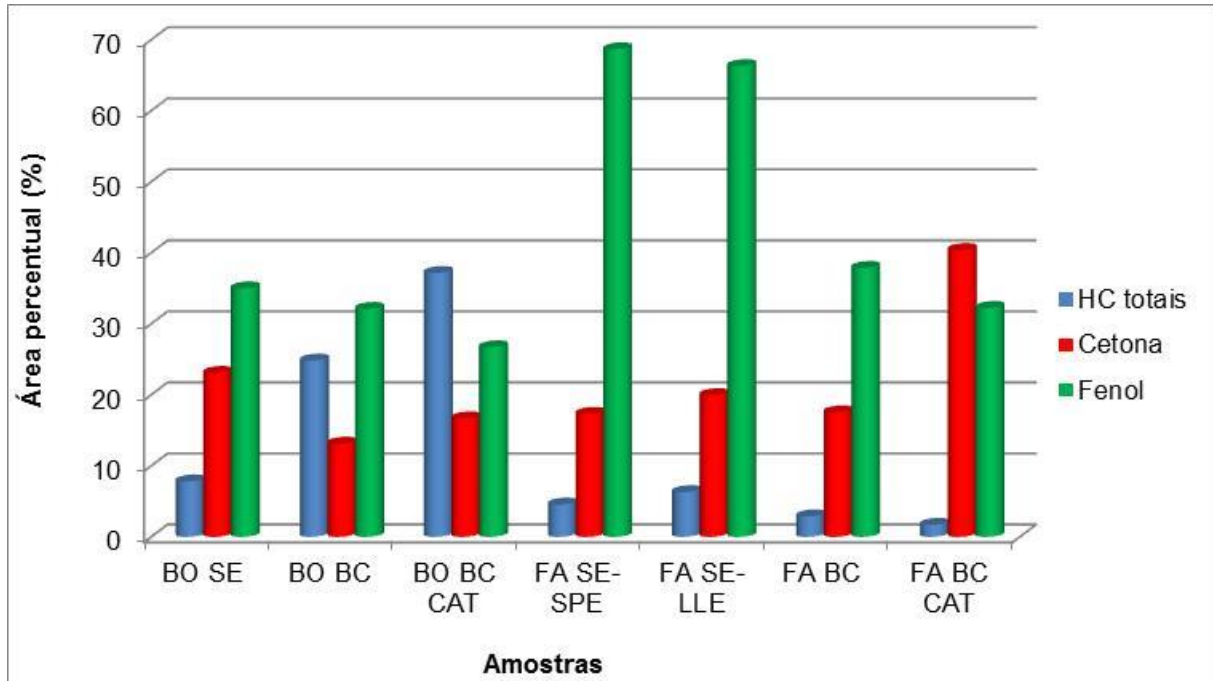


Figura 50: Distribuição das áreas percentuais das cetonas, fenóis e hidrocarbonetos tentativamente identificados nos bio-óleos brutos analisados (BO SE, BO BG, BO BG CAT) e nas suas respectivas fases aquosas (FA SE LLE, FA SE SPE, FA BG, FA BG CAT).

5 CONCLUSÕES

5 CONCLUSÕES

No presente trabalho foram estudados três bio-óleos obtidos pela pirólise de diferentes biomassas, porém em um mesmo sistema pirolítico, o que permitiu avaliar a composição das biomassas estudadas. Apesar dos bio-óleos serem oriundos de diferentes biomassas, a composição química dos mesmos foi bastante similar, ambos apresentaram uma grande variedade de compostos, principalmente hidrocarbonetos e compostos oxigenados como cetonas e fenóis.

O fracionamento em coluna aberta com sílica realizado nas amostras dos bio-óleos de serragem e do bagaço da cana-de-açúcar apresentou bons resultados, uma vez que foi possível a obtenção de frações com diferentes distribuições e proporções de compostos de acordo com as misturas de solventes utilizadas para fazer a eluição, separando a maioria dos compostos em relação a suas polaridades. Os hidrocarbonetos foram majoritários nas frações apolares (F1 e F2) enquanto nas polares predominaram fenóis e cetonas. A eficiência do processo de fracionamento, baseado nos resultados obtidos, aliado ao baixo custo da técnica, demonstram que o fracionamento é uma boa alternativa para diminuir a complexidade de amostras complexas, como bio-óleos.

As fases aquosas de ambos os bio-óleos apresentaram grande quantidade de compostos oxigenados, principalmente fenóis e cetonas. No extrato da fase aquosa do bio-óleo de serragem, a área dos compostos fenólicos representou cerca de 70% do total identificada, enquanto nos extratos orgânicos das fases aquosas dos bio-óleos (catalisado e não catalisado) do bagaço de cana-de-açúcar o percentual foi em torno de 40%.

O uso do catalisador ZSM-5 foi eficiente na redução dos compostos oxigenados e houve um aumento da quantidade de hidrocarbonetos aromáticos na composição do bio-óleo gerado.

Quanto às técnicas analíticas, pode-se constatar que o uso do índice de retenção com programação linear de temperatura foi fundamental para a identificação tentativa de uma grande quantidade de compostos presentes nas amostras avaliadas neste trabalho, fornecendo maior certeza na sua identificação do que pela simples avaliação do espectro de massas e posição relativa no diagrama bidimensional.

A utilização da técnica GC×GC, aliada aos gráficos de dispersão (Microsoft Excel™) e ao LTPRI confirmou sua enorme capacidade de identificação de compostos em amostras complexas. Esta identificação, com a riqueza de detalhes aqui apresentada, seria impossível com o uso apenas de sistemas monodimensionais. A classificação espacial obtida permite a previsão e dedução de estruturas e número de substituintes nas cadeias hidrocarbônicas devido à apresentação ordenada no espaço bidimensional.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Huber, G.W.; Iborra, S.; Corma, A.; *Chem Rev.* 2006, 106, 4044.
2. Ogeda, T.L.; Petri, D.F.S.; *Quim. Nova* 2010, 33, 1549.
3. Galembeck, F.; Barbosa, C.A.S.; de Sousa, R.A.; *Quim. Nova* 2009, 32, 571.
4. Lora, E.S.; Andrade, R.V.; *Renew. Sust. Energy Rev.* 2009, 13, 777.
5. Jiang, X.; Ellis, N.; Zhong Z.; *Chin. J. Chem. Eng.* 2010, 18, 1018.
6. European Commission, Communication from the Commission: Energy for the Future: Renewable Energy Sources—White Paper for a Community Strategy and Action Plan. COM (97) 599, Final of 26.11.97, Brussels, 1997.
7. International Energy Agency, World Energy Outlook 2000, IEA, Paris, 2000.
8. Ward J.; Rasul, M.G.; Bhuiya, M. M. K.; *Procedia Eng.* 2014, 90, 669.
9. Demirbaş, A.; *Energy Convers. Manage.* 2001, 42, 1357.
10. Guedes, C.L.B.; Adão, D.C.; Quessada, T.P.; Borsato, D.; Galão, O.F.; Mauro, E.D.; Pérez, J.M.M.; Rocha, J.D.; *Quim. Nova* 2010, 33, 781.
11. Akhtar, J.; Amin, N.A.S.; *Renew Sust Energ Rev.* 2011, 15, 1615.
12. Shen, D.K.; Gu, S.; *Bioresour. Technol.* 2009, 100, 6496.
13. Goyal, H.B.; Seal, D.; Saxena, R.C.; *Renewable Sustainable Energy Rev.* 2008, 12, 504.
14. Mohan, D.; Pittman, C.U.J.; Steele, P.H.; *Energy Fuels* 2006, 20, 848.
15. Özbay, N.; Apaydın-Varol, E.; Uzun, E.B.; Pütün, A.E.; *Energy* 2008, 33, 1233.
16. Özçimen, D.; Meriçboyu, E.; A.; *Renew Energ.* 2010, 35, 1319.
17. Atlas de Energia Elétrica do Brasil, Parte II (Fontes renováveis), cap.4, 3ªed. Brasília, 2008. ANEEL (Agência Nacional de Energia elétrica), pag. 65-74, em <http://www.unica.com.br/faq/>, acessado em 12/01/2014.
18. Brasil líder mundial em conhecimento e tecnologia de cana e etanol, FAPESP (Fundação de Amparo À Pesquisa do Estado de São Paulo, 2007, em <http://www.unica.com.br/faq/>, acessado em 12/01/2014.

19. Acompanhamento da Safra Brasileira de Cana-de-Açúcar, Safra 2015/16, disponível em: <http://www.conab.gov.br/conteudos.php?a=1253&t=2>, acessado em 05/05/2015.
20. Cunha, J.A.; Pereira, M. M.; Valente, L.M.M.; de la Piscina, P.R.; Homs, N.; Santos, M.R.L.; *Biomass Bioenergy* 2011, 35, 2106.
21. Santos, F.A.; de Queiróz, J.H.; Colodette, J.L.; Fernandes, S.A.; Guimarães, V.M.; Rezende, Sebastião T.; *Quim. Nova* 2012, 35, 1004.
22. Szczerbowski, D.; Pitarelo, A.P.; Zandoná Filho, A.; Ramos, L.P.; *Carbohydr. Polym.* 2014, 114, 95.
23. Yoon, L.W.; Ang, T.N.; Ngoh, G.C.; Chua, A.S.M.; *Biomass Bioenerg.* 2012, 36, 160.
24. Velmurugan, R.; Muthukumar, K.; *Biochem Eng J.* 2012, 63, 1.
25. Rocha, G.J.M.; Martin, C.; Soares, I.B.; Maior, A.M.S.; Baudel, H.M.; Abreu, C.A.M.; *Biomass Bioenerg.* 2011, 35, 663.
26. Diagnóstico dos Resíduos Orgânicos do Setor Agrossilvopastoril e Agroindústrias Associadas, Relatório de Pesquisa, IPEA (Instituto de Pesquisas Econômicas Aplicadas), Brasília, 2012.
27. Nolasco, A. M.; Resíduos da colheita e beneficiamento da caixeta – *Tabebuia cassinoides* (Lam.) DC.: caracterização e perspectivas. (Tese de Doutorado), Universidade de São Paulo, São Paulo, 2000.
28. Bertero, M.; Sedran, U.; *Bioresource Technol.* 2013, 135, 644.
29. Wang, Y.; Wang, H.; Lin, H.; Zheng, Y.; Zhao, J.; Pelletier, A.; Li, K.; *Biomass Bioenerg.* 2013, 59, 158.
30. Jung, S.-H.; Kang, B.-S.; Kim, J.-S.; *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 2008, 82, 240.
31. Heo, H.S.; Park, H.J.; Park, Y.-K.; Ryu, C.; Suh, D.J.; Suh, Y.-W.; Yim, J.-H.; Kim, S.-S.; *Bioresource Technol.* 2010, 101, S91.
32. Schneider, J.K.; da Cunha, M.E.; dos Santos, A.L.; Maciel, G.P.S.; Brasil, M.C.; Pinho, A.R.; Mendes, F.L.; Jacques, R.A.; Caramão, E.B.; *J. Chromatogr. A* 2014, 1356, 236.
33. Urban P. Process for converting cellulose. U.S. Patent 3,864,097; 1975.
34. Bridgwater, T.; *J Sci Food Agric.* 2006, 86, 1755.
35. Arbex, M.A.; Cançado, J.E.D.; Pereira, L.A.A.; Braga, A.L.F.; Saldiva, P. H.N.; *J. bras. pneumol.* 2004, 30, 158.
36. Guyon, P.; Frank, G.; Welling, M.; Chand, D.; Artaxo, P.; Rizzo, L.; Nishioka, G.; Kolle, O.; Fritsch, H.; Silva Dias, M. A. F.; Gatti, L. V.; Cordova, M.; Andreae, M. O.; *Atmos. Chem. Phys.* 2005, 5, 2791.
37. Bridgwater, A.V.; *Chem. Eng. J.* 2003, 91, 87.

38. Ninduangdee, P.; Kuprianov, V.I.; *Energ Convers Manage.* 2014, 85, 800.
39. Fournel, S.; Palacios, J.H.; Morissette, R ; Villeneuve, J.; Godbout, S.; Heitz, M.; Savoie, P.; *Applied Energy* 2015, 141, 247.
40. Bridgwater, A.V.; *Fuel* 1995, 74, 631.
41. Zhou, Z.; Yin, X.; Xu, J.; Ma, L.; *Energy Policy* 2012, 51, 52.
42. Jouiad, M.; Al-Nofeli, N.; Khalifa, N.; Benyettou, F.; Yousef, L.F.; *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 2015, 111, 183.
43. Lee, Y.; Eum, P.-R.-B.; Ryu, C.; Park, Y.-K.; Jung, J.-H.; Hyun, S.; *Bioresour. Technol.* 2013, 130, 345.
44. Chang, Y.-M.; Tsai, W.-T.; Li, M.-H.; *Anal. Appl. Pyrolysis* 2015, 111, 88.
45. Shabangu; S.; Woolf, D.; Fisher, E.M.; Angenent, L.T.; Lehmann, J.; *Fuel* 2014, 117, 742.
46. Ji-lu, Z.; *Journal J. Anal. Appl. Pyrolysis* 2007, 80, 30.
47. Phan, B.M.Q.; Duong, L.T.; Nguyen, V.D.; Tran, T.B.; Nguyen, M.H.H.; Nguyen, L.H.; Nguyen, D.A.; Luu, L.C.; *Biomass Bioenerg.* 2014, 62, 74.
48. Azargohar, R.; Jacobson, K.L.; Powell, E.E.; Dalai, A.K.; *J Anal Appl Pyrol.* 2013, 104, 330.
49. Choi, H.S.; Choi, Y.S.; Park, H.C.; *Renew Energ.* 2012, 42,131.
50. Bridgwater, A. V. *Appl. Catal. A* 1994, 116, 5.
51. Bridgwater, A. V.; Kuester, J.L. *Research in Thermochemical Biomass ConVersion*; Elsevier Science Publishers: London, 1991.
52. Bridgwater, A.V.; *Catal. Today* 1996, 29 (1-4), 285.
53. Bridgwater, A.V.; *Biomass Bioenerg.* 2012, 38, 68.
54. Lou, R.; Wu, S.; Lyu, G.; *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 2015, 111, 27.
55. Miao, X.; Wu, Q.; Yang, C.; *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 2004, 71, 855.
56. Siengchum, T.; Isenberg, M.; Chuang, S.S.C.; *Fuel* 2013, 105, 559.
57. Pighinelli, A.L.M.T.; Boateng, A.A.; Mullen, C.A.; Elkasabi, Y.; *Energy for Sustainable Development* 2014, 21, 42.
58. Pattiya, A.; *Bioresource Technol.* 2011, 102, 1959.
59. Pattiya, A.; Titiloye, J.O.; Bridgwater, A.V.; *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 2008, 81, 72.
60. Taarning, E.; Osmundsen, C.M.; Yang, X.; Voss, B.; Andersen S.I.; Christensen, C.H.; *Energy Environ Sci.* 2011, 4, 793.

61. Butler, E.; Devlin, G.; Meier, D.; McDonnell K.; *Renew Sust Energy Rev.* 2011, 15, 4171.
62. Corma, A.; Iborra, S.; Velty, A.; *Chem Rev.* 2007, 107, 2411.
63. Huber, G.W.; Corma, A.; *Synergies Between Bio and Oil Refineries for the Production of Fuels from Biomass*, Angewandte Chemie International Edition, 2007, Vol.46, p.7184.
64. Grecco, S. deT.F.; Rangel, M.do C.; *Quim. Nova* 2013, 36, 131.
65. Braga, A.A.C.; Morgon, N.H.; *Quim. Nova* 2007, 30, 178.
66. Moreno, E.L.; Rajagopal, K.; *Quim. Nova* 2009, 32, 538.
67. Wang, L.; Lei, H.; Bu, Q.; Ren, S.; Wei, Y.; Zhu, L.; Zhang, X.; Liu, Y.; Yadavalli, G.; Lee, J.; Chen, S.; Tang, J.; *Fuel* 2014, 129, 78.
68. Iliopoulou, E.F.; Stefanidis, S.D.; Kalogiannis, K.G.; Delimitis, A.; Lappas, A.A.; Triantafyllidis, K.S.; *Appl Catal B-Environ.* 2012, 127, 281.
69. Luna, F.J.; Schuchardt, U.; *Quim. Nova* 2001, 24, 885.
70. French, R.; Czernik, S.; *Fuel Process. Technol.* 2010, 91, 25.
71. Weitkamp, J.; *Solid State Ionics* 2000, 131,175.
72. Jacobson, K.; Maheria, K.C.; Dalai, A.K.; *Renewable Sustainable Energy Rev.* 2013, 23, 91.
73. Corma, A.; *J. Catal.* 2003, 216, 298.
74. Lappas, A. A.; Bezergianni, S.; Vasalos, I. A.; *Catal. Today* 2009, 145, 55.
75. Samolada, M.C.; Papafotica, A.; Vasalos, I.A.; *Energy Fuels* 2000, 14, 1161.
76. Argauer, R.J.; Landolt, G.R.; Crystalline zeolite ZSM-5 and method of preparing the same. US Patent, 3,702, 886, 1972.
77. Tan, S.; Zhang, Z.; Sun, J.; Wang, Q.; *Chin. J. Catal.* 2013, 34, 641.
78. McCusker, L.B.; Baerlocher, C.; Zeolite Structures, 2nd completely revised and expanded edition. In: *van Bekkum H, Flanigen EM, Jacobs PA, Janzen JC*, editors. Chapter 3, *Studies in Surface Science and Catalysis* 137 Amsterdam: Elsevier (2001) 37.
79. Czernik, S.; Bridgwater, A.V.; *Energy Fuels* 2004, 18, 590.
80. Horne, P.A.; Williams, P.T.; *Renew Energy* 1994, 5, 810.
81. Zheng, A.; Zhao, Z.; Chang, S.; Huang, Z.; Wu, H.; Wang, X.; He, F.; Li, H.; *J. Mol. Catal. A: Chem.* 2014, 383–384, 23.
82. Thangalazhy-Gopakumar, S.; Adhikar, S.; Chattanathan, S. A.; Gupta, R.B.; *Bioresour. Technol.* 2012, 118, 150.

-
83. Huang, Y.; Wei, L.; Julson, J.; Gao, Y.; Zhao, X.; *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 2015, 111, 148.
 84. Mihalcik, D.J.; Mullen, C.A.; Boateng, A.A.; *J. Anal. Appl. Pyrolysis*, 2011, 92, 224.
 85. Carlson, T.R.; Cheng, Y.T.; Jae, J.; Huber, G.W.; *Energy Environ. Sci.* 2011, 4, 145.
 86. Leprince, P.; In: *Conversion Processes*, vol. 3, cap. 3, Technip, França, 2001.
 87. Mante, O.D.; Agblevor, F.A.; Oyama, S.T.; McClung, R.; *Fuel* 2014, 117, 649.
 88. Lappas, A.A.; Samolada, M.C.; Iatridis, D.K.; Voutetakis, S.S.; Vasalos, I.A.; *Fuel* 2002, 81, 2087.
 89. Milne, T. A.; Agblevor, F.; Davis, M.; Deutch, S.; Johnson, D. In *DeVelopments in Thermal Biomass ConVersion*; Bridgwater, A. V., Boocock, D. G. B., Eds.; Blackie Academic and Professional: London, UK, 1997.
 90. Tanneru, S.K.; Steele, P.H., *Fuel* 2014, 133, 326.
 91. Leng, S.; Wang, X.; He, X.; Liu, L.; Liu, Y.; Zhong, X.; Zhuang, G.; Wang, J-G.; *Catal. Commun.* 2013, 41, 34.
 92. Chiaramonti, D.; Bonini, M.; Fratini, E.; Tondi, G.; Gartner, K.; Bridgwater, A.V.; Grimm, H.P.; Soldaini, I.; Webster, A.; Baglioni, P.; *Biomass Bioenergy* 2003, 25, 101.
 93. Czernik, S.; French, R.; Feik, C.; Chornet, E.; *Ind. Eng. Chem. Res.* 2002, 41, 4209.
 94. Choi, G.-G.; Oh, S.-J.; Lee, S.-J.; Kim, J.-S.; *Bioresour. Technol.* 2015, 178, 99.
 95. Amen-Chen, C.; Riedl, B.; Wang, X.M.; Roy, C.; 2002. Softwood bark pyrolysis oil-PF resoles. Part1. Resin synthesis and OSB mechanical properties. *Holzforschung* 56, 167–175.
 96. Sukhbaatar, B.; Steele, P.H.; Kim, M.G.; *Bio Resources* 2009, 4, 789.
 97. Bu, Q.; Lei, H.; Wang, L; Wei, Y.; Zhu, L.; Liu, Y.; Liang, J.; Tang, J.; *Bioresour. Technol.* 2013, 142, 546.
 98. Salema, A.A.; Ani, F.N.; *J. Anal. Appl. Pyrol.* 2013, 96, 162.
 99. Bu, Q.; Lei, H.; Ren, S.; Wang, L.; Zhang, Q.; Tang, J.; Ruan, R.; *Bioresour. Technol.* 2012, 108, 274.
 100. Liang, J.; Lin, Y.; Wu, S.; Liu, C.; Lei, M.; Zeng, C.; *Bioresour. Technol.* 2015, 181, 220.
 101. Zhu, X.-f.; Lu, Q.; *Production of Chemicals from Selective FastPyrolysis of Biomass*, Biomass, 2010. Maggy Ndombo Benteke Momba (Ed.), ISBN: 978 953-307-113-8. InTech, Disponível em: <http://www.intechopen.com/books/biomass/production-of-chemicals-from-selective-fast-pyrolysis-of-biomass>.
 102. Dobele, G.; Rossinskaja, G.; Dizhbite, T.; Telysheva, G.; Meier, D.; Faix, O.; *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 2005, 74, 401.
-

-
103. Wan, Y.Q.; Chen, P.; Zhang, B.; Yang, C.Y.; Liu, Y.H.; Lin, X.Y.; Ruan, R; *J. Anal. Appl. Pyrol.* 2009, 86, 161.
 104. Mahfud, F.H.; van Geel, F.P.; Venderbosch, R.H.; Heeres, H.J.; *Sep. Sci. Technol.*, 2008, 43, 3056.
 105. Fisk, C.A.; Morgan, T.; Ji, Y.; Crocker, M.; Crofcheck, C.; Lewis, S.A.; *Appl. Catal. A* 2009, 358,150.
 106. Wang, S.; Guo, Z.; Cai, Q.; Guo, L.; *Biomass Bioenergy* 2012, 45,138.
 107. Yakovlev, V.A.; Khromova, S.A.; Sherstyuk, O.V.; Dundich, V.O.; Ermakov, D.Y.; Novopashina, V.M.; Lebedev, M.Y.; Bulavchenko, O.; Parmon, V.N.; *Catal. Today* 2009, 144, 362.
 108. ZHONG, W.-C.; GUO, Q.-Ji.; WANG, X.-Y..; ZHANG, L.; *J Fuel Chem Technol.* 2013, 41, 571.
 109. Richard, C.J.; Patel, B.; Chadwick, D.; Hellgardt, K.; *Biomass Bioenergy* 2013, 56, 446.
 110. Elliott, D.C.; Hart, T.R.; Neuenschwander, G.G.; Rotness, L.J.; Zacher, A.H.; *Environ Prog Sustain Energy* 2009, 3, 441.
 111. Mortensen, P.M.; Grunwaldt, J.D.; Jensen, P.A.; Knudsen, K.G.; Jensen, D.A.; *Appl. Catal. A* 2011, 407, 1.
 112. Zhang, L.; Liu, R.; Yin, R.; Mei, Y; *Renewable Sustainable Energy Rev.* 2013, 24, 66.
 113. Xiu, S.; Shahbazi, A.; *Renewable Sustainable Energy Rev.* 2012, 16, 4406.
 114. Kanaujia, P.K.; Sharma, Y.K.; Garg, M.O.; Tripathi, D.; Singh, R.; *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 2014, 105, 55.
 115. Imran, A.; Bramer, E.A.; Seshan, K.; Brem, G.; *Fuel Process. Technol.* 2014, 127, 72.
 116. LI, H-y.; YAN Y.-j.; REN, Z.-w.; *J Fuel Chem Technol.* 2008, 36, 666.
 117. Bertero, M.; Sedran, U.; *Bioresour. Technol.* 2013, 135, 644.
 118. Vichaphund, S.; Aht-ong, D.; Sricharoenchaikul, V.; Atong, D.; *Renew Energ.* 2014, 65, 70.
 119. Abou-Yousef, H.; Hassan, E.B.; *Fuel* 2014, 137, 115.
 120. Xu, R.; Ferrante, L.; Briens, C.; Berruti, F.; *J. Anal. Appl. Pyrol.* 2011, 91, 263.
 121. Vitasari, C.R.; Meindersma, G.W.; de Haan, A.B.; *Bioresour. Technol.* 2011, 102, 7204.
 122. Zhu, Z.; Rosendahl, L.; Toor, S.S.; Yu, D.; Chen, G.; *Appl. Energy* 2015, 137, 183.
 123. Zhu, Z.; Rosendahl, L.; Toor, S.S.; Yu, D.; Chen, G.; *Applied Energy* 2015, 137, 183.

124. García-Pérez, M.; Chaala, A.; Pakdel, H.; Kretschmer, D.; Roy, C.; *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 2007, 78,104.
125. Ma, B.; Agblevor, F.A.; *Biomass Bioenergy* 2014, 64, 337.
126. Wang, Z.; Lin, W.G.; Song, W.L.; Du L.; Li, Z.J.; Yao, J.Z.; *Chinese Sci Bull.* 2011, 56, 1434.
127. Das, P.; Sreelatha, T.; Ganesh, A.; *Biomass Bioenergy* 2004, 27, 265.
128. Rutkowski, P.; *Waste Manage* 2009, 29, 2983.
129. da Cunha, M.E.; Schneider, J.K.; Brasil, M.C.; Cardoso, C.A.; Monteiro, L.R.; Mendes, F.L.; Pinho, A.; Jacques, R.A.; Machado, M.E.; Freitas, L.S.; Caramão, E.B.; *Microchem. J.* 2013, 110, 113.
130. Acikgoz, C.; Kockar, O.M.; *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 2009, 85, 151.
131. Lu, R.; Sheng, G.-P.; Hu, Y.-Y.; Zheng, P.; Jiang, H.; Tang, Y.; Yu, H.-Q.; *Biomass Bioenergy* 2011, 35, 671.
132. Ba, T.; Chaala, A.; Garcia-Perez, M.; Roy, C.; *Energ Fuel* 2004, 18, 188.
133. Adahchour, M.; Beens, J.; Brinkman, U.A.Th.; *J. Chromatogr. A* 2008, 1186, 67.
134. Mostafa, A.; Edwards, M.; Górecki, T.; *J. Chromatogr. A* 2012, 1255, 38.
135. Mühlen, C. Von.; Zini, C. A.; Caramão, E. B.; *Quim. Nova* 2006, 29, 765.
136. Harynuk, J.; Gorecki, T.; *J. Chromatogr. A* 2003, 1019, 53.
137. Górecki, T.; Harynuk, J.; Panić, O.; *J. Sep.Sci.* 2004, 27, 359.
138. Hoh, E.; Mastovska, K.; Lehotay, S.J.; *J. Chromatogr. A* 2007, 1145, 210.
139. Pedroso, M.P.; de Godoy, L.A.F.; Fidélis, C.H.V.; Ferreira, E.C.; Poppi, R.J. Augusto, F.; *Quim. Nova* 2009, 32, 421.
140. Dalluge J.; Beens, J.; Brinkman, U.A.Th.; *J. Chromatogr. A* 2003, 1000, 69.
141. Cortes, H.J.; Winniford, B.; Luong, J.; Pursch, M.; *J. Sep. Sci.* 2009, 32, 883.
142. Adahchour, M.; Beens, J.; Vreuls, R.J.J.; Brinkman; *Trac-Trend Anal Chem.* 2006, 25, 821.
143. Tranchida, P.; Mondello, L.; Poynter, S.D.H.; Shellie, R.; in: L. Mondello (Ed.), *Comprehensive Two-dimensional Gas Chromatography Combined with Mass Spectrometry. Comprehensive Chromatography in Combination with Mass Spectrometry*, John Wiley & Sons Inc. 2011, p. 171.
144. de Boer, J.; de Geus, H.; Brinkman, U.A.T.; *Environ. Sci. Technol.* 1997, 31, 873.
145. Phillips, J.B.; Beens, J.; *J. Chromatogr. A* 1999, 856, 331.
146. Dalluge, J.; Vreuls, R.J.J.; Beens, J.; Brinkman, U.A.T.; *J. Sep. Sci.* 2002, 25, 201.

-
147. Amador-Munoz, O.; Marriott, P.J.; *J. Chromatogr. A* 2008, 1184, 323.
 148. Von Muhlen, C.; Zini, C.A.; Caramão, E.B.; Marriott, P.J.; *J. Chromatogr. A* 2006, 1105, 39.
 149. Zeng, Z.; Li, J.; Hugel, H.M.; Xu, G.; Marriott, P.J.; *TrAC, Trends Anal. Chem.* 2014, 53, 150.
 150. Fullana, A.; Contreras, J. A.; Striebich, R. C.; Sidhu, S. S.; *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 2005, 74, 315.
 151. Marsman, J.H.; Wildschut, J.; Mahfud F.; Heeres, H.J.; *J. Chromatogr. A* 2007, 1150, 21.
 152. Windt, M.; Meier, D.; Marsman, J.H.; Heeres, H.J.; Koning, S.; *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 2009, 85, 38.
 153. Sfetsasa, T.; Michailof, C.; Lappas, A.; Li, Q.; Kneale, B.; *J. Chromatogr. A* 2011, 1218, 3317.
 154. Marsman, J.H.; Wildschut, J.; Evers, P.; Koning, S.; Heeres, H.J.; *J. Chromatogr. A* 2008, 1188, 17.
 155. Moraes, M.S. A.; Migliorini, M.V.; Damasceno, F.C.; Georges, F.; Almeida, S.; Zini, C. A.; Jacques, R. A.; Caramao, E. B.; *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 2012, 98, 51.
 156. Silva, R.V.S.; Casilli, A.; Sampaio, A.L.; Ávila, B.M.F.; Veloso, M.C.C.; Azevedo, D.A.; Romeiro, G.A.; *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 2014, 106, 152.
 157. Moraes, M.S.A.; Georges, F.; Almeida, S.R.; Damasceno, F.C.; Maciel, G. P. da S.; Zini, C.A.; Jacques, R.A.; Caramão, E. B.; *Fuel Process. Technol.* 2012, 101, 35.
 158. Tessarolo, N.S.; Silva, R.C.; Vanini, G.; Pinho, A.; Romão, W.; Castro, E. V.R.; Azevedo, D. A.; *Microchem. J.* 2014, 117, 68.
 159. Almeida, R.S.; Pirólise rápida de casca de arroz: Estudo de Parâmetros e caracterização de produtos. (Dissertação Mestrado), Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Porto Alegre, RS, 2010.
 160. Georges F.; Caracterização da palha da cana-de-açúcar do Rio Grande do Sul e de seus produtos de pirólise. (Dissertação Mestrado), Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Porto Alegre, RS, 2011.
 161. Moraes, A. S. M.; Avaliação da composição química de bio-óleos de pirólise de diferentes biomassas utilizando a cromatografia gasosa monodimensional e a bidimensional abrangente. (Tese de doutorado), Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Porto Alegre, RS, 2012.
 162. Moraes, M.S.A.; Bortoluzzi, J.H.; Migliorini, M.V.; Zini, C.A.; Caramão, E.B.; *Scientia Chromatographica* 2011, 3, 301.
 163. Barbará, J. A.; Emprego de diferentes técnicas de extração e da GCxGC para o estudo da fase aquosa gerada durante a produção do bio-óleo de palha de cana-de-açúcar. (Dissertação Mestrado), Porto Alegre, RS, Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, 2012.

-
164. Maciel G. S. P.; Estudo da fração aquosa proveniente da pirólise da palha de cana-de-açúcar. (Dissertação Mestrado), Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Porto Alegre, RS, 2011.
 165. Faccini, C. S.; Obtenção de bio-óleo por pirólise de resíduos da indústria de celulose e sua caracterização por cromatografia gasosa. (Tese de doutorado), Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Porto Alegre, RS, 2012.
 166. Faccini, C.S.; Dalla Vecchia, I.; Caramão E.B.; Lima, N.; Zini, C.A.; *Revista O Papel* 2011, n 10, 55.
 167. Faccini, Candice S.; Dalla Vecchia, I.; Ribeiro, D.; Zini, C.A.; Caramão, E.B.; *J. Braz. Chem. Soc.* 2013, 24, 1085.
 168. Torri, I.D.V.; Caracterização de bio-óleos obtidos por pirólise da serragem de *Eucalyptus* sp. (hardwood) e *Picea abies* (softwood) utilizando as técnicas de cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas. (Dissertação Mestrado), Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Porto Alegre, RS, 2013.
 169. Cunha, M. E.; Caracterização de bio-óleos da pirólise da palha de cana de açúcar usando fracionamento em sistema pressurizado e cromatografia gasosa mono e bidimensional com detector de espectrometria de massas com analisador quadrupolar. (Tese de doutorado), Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Porto Alegre, RS, 2013.
 170. Schneider J.K.; Aplicação da cromatografia gasosa bidimensional abrangente acoplada a espectrometria de massas com analisador quadrupolar na caracterização de bio-óleo da palha de cana-de-açúcar. (Dissertação Mestrado), Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Porto Alegre, RS, 2013.
 171. Onorevoli, B.; Estudo do *Crambe Abyssinica* como fonte de matérias-primas oleaginosas: óleo vegetal, ésteres metílicos e bio-óleo. (Dissertação Mestrado), Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Porto Alegre, RS, 2012.
 172. Onorevoli, B.; Machado, M.E.; Dariva, C.; Franceschi, E.; Krause, L.C.; Jacques, R. A.; Caramão, E.B.; *Ind. Crops Prod.* 2014, 52, 8.
 173. Primaz, C.T.; Caracterização dos compostos presentes no bio-óleo obtido a partir da pirólise da borra de café. (Dissertação Mestrado), Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Porto Alegre, RS, 2013.
 174. Lazzari, E.; Pirólise de resíduos agroindustriais de manga: Análise cromatográfica do bio-óleo. (Dissertação Mestrado), Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Porto Alegre, RS, 2014.
 175. Migriorini, M.V.; Aplicação de cromatografia gasosa bidimensional Abrangente e espectrometria de massas por tempo de Voo no estudo dos bio-óleos obtidos pela pirólise da Palha de cana-de-açúcar e do caroço de pêssego. (Tese de doutorado), Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Porto Alegre, RS, 2014.
 176. Migliorini, M.V.; Moraes, M.S.A.; Machado, M.E.; Caramão, E.B.; *Scientia Chromatographica* 2013, 5, 1.

-
177. Schena, T.; Pirólise da fibra da casca de coco: avaliação de dois processos de upgrading e caracterização do bio-óleo. (Dissertação Mestrado), Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Porto Alegre, RS, 2014.
 178. Almeida, T.; Bispo, M.D.; Cardoso, A.R.T.; Migliorini, M.V.; Schena, T.; Campos, M.C.V.; Machado, M. E.; López, J.A.; Krause, L.C.; Caramão, E.B., *J. Agric. Food Chem.* 2013, 61, 6812.
 179. Tessarolo N.S.; dos Santos, L.R.M.; Silva, R.S.F.; Azevedo, D.A.; *J. Chromatogr. A* 2013, 1279, 68.
 180. Mendes, F.L.; Pinho, A.R.; Figueiredo, M.A.G.; *Defect and Diffusion Forum* 2013, 334-335, 13.
 181. Caramão, E.B.; Caracterização química de alcatrão de carvão. Tese de Doutorado, Universidade de São Paulo, USP, São Carlos, SP, 1991.
 182. Silverstein, D.J.; Webster, R.M.; Kiemle, F.X.; *Identificação espectrométrica de compostos orgânicos*, 7ª edição. LTC, 2007.
 183. Kovatz, E.; *Helv. Chim. Acta.*1958, 41, 1915.
 184. Van den Dool H; Kratz, P.D.: *J. Chromatogr. A* 1963, 11, 463.
 185. Ong, R.; Marriott, P.; Morrison, P.; Haglund, P.; *J. Chromatogr. A.* 2002, 962, 135.
 186. Ahmaruzzaman, M.; *Adv. Colloid Interfac. Sci.* 2008, 143, 48.
 187. Surmont, R.; Verniest, G.; De Kimpe, N.; *J. Org. Chem.* 2010, 75, 5750.
 188. Phuong, T.M.D.; McAtee, J.R.; Watson, D.A.; Lobo, R.F.; *ACS Catalysis.* 2013, 3, 41.
 189. Chen, N.Y.; Yan, T.Y.; *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* 1986, 25, 151.
 190. Carlson, T.R.; Tompsett, G.A.; Conner, W.C.; Huber, G.W.; *Top Catal.* 2009, 52, 241.
 191. Pütün, E.; Uzun, B.B.; Pütün, A. E.; *Energy Fuels* 2009, 23, 2248.
 192. Stefanidis, S.D.; Kalogiannis, K.G.; Iliopoulou, E.F.; Lappas, A.A.; Pilavachi, P.A.; *Bioresour. Technol.* 2011, 102, 8261.
 193. dos Santos, M.L.; de Lima, O.J.; Nassar, E.J.; Ciuffi K.J.; Calefi, P.S.; *Quim. Nova* 2011, 34, 507.
 194. Martins, C.R; Lopes, W. A.; de Andrade, J. B.; *Quim. Nova* 2013, 36, 1248.
 195. Lin, H.; Gan, T.; Wu, K.; *Food Chem.* 2009, 113, 701.
 196. Ziyatdinova, G.K.; Gainetdinova, A.A.; Budnikov, G.K.; *J. Anal. Chem.* 2010, 65, 929.
 197. Fiegel, H.; Voges, H.W.; Hamamoto, T.; Umemura, S.; Iwata, T.; Miki, H.; Fujita, Y.; Buysch, H.J.; Garbe, D.; Paulus, W.; Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, Wiley-VCH, Weinheim, 2002.

198. Barner, B.A.; *Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis*, J. Wiley & Sons, 2004.
199. Yang, L.; Zhou, W.; Seshan, K.; Li, Y.; *J. Mol. Catal. A: Chem.* 2013, 368– 369, 61.
200. Liu, H.; Lepoittevin, B.; Roddier, C.; Guerineau, V.; Bech, L.; Herry, J.-M.; Bellon-Fontaine, M.-N.; Roger, P.; *Polymer* 2011, 52, 1908.
201. Fitzgerald, D.J.; Stratford, M.; Gassin, M.J.; Narbad, A.; *J Agr Food Chem.* 2005, 53, 1769.
202. Kim, S.-J.; Jung, S.-H.; Kim, J.-S.; *Bioresour. Technol.* 2010, 101, 9294.
203. Al-Bataineh, S.A.; Britcher, L.G.; Griesser, H.J.; *Surf. Sci.* 2006, 600, 952.
204. Romero, D.; Traxler, M.F.; López, D.; Kolter, R.; *Chem. Rev.* 2011, 111, 5492.

7 ANEXOS

7 ANEXOS

Tabela 1: Identificação dos compostos do bio-óleo bruto não catalítico do bagaço da cana-de-açúcar (BO BC) por GCxGC/TOF MS.

¹ t _R (min)	² t _R (s)	¹⁺² t _R (min) ^a	Nome	S ^b	R ^c	A (%) ^d	Fórmula	LTPRI ^e	
								IR _{cal.}	IR _{Lit}
31,65	4,71	31,73	Indeno*	916	916	0,266	C9H8	1045	1045
34,50	4,49	34,57	C1 indeno	782	872	0,082	C10H10	1083	
39,90	4,76	39,98	1-metil indeno*	870	871	0,206	C10H10	1157	1172
43,05	4,62	43,13	C2 indeno	682	794	0,003	C11H12	1201	
46,35	4,83	46,43	C2 indeno	784	848	0,010	C11H12	1248	
47,10	4,76	47,18	C2 indeno	547	816	0,280	C11H12	1259	
47,40	4,75	47,48	C2 indeno	782	859	0,050	C11H12	1263	
47,85	4,83	47,93	C2 indeno	847	855	0,055	C11H12	1269	
48,15	4,85	48,23	C2 indeno	879	884	0,019	C11H12	1274	
49,80	5,44	49,89	etilideno indeno	904	929	0,259	C11H10	1297	
38,85	4,41	38,92	4-metil 2,3-dihidro indeno*	889	889	0,042	C10H12	1143	1142
39,60	4,53	39,68	5-metil, 2,3-dihidro indeno*	892	892	0,070	C10H12	1153	1140
43,05	4,39	43,12	C2 dihidro indeno	607	826	0,009	C11H14	1201	
45,75	4,55	45,83	C2 dihidro indeno	590	802	0,015	C11H14	1239	
50,25	4,80	50,33	C3 dihidro indeno	678	785	0,014	C12H16	1304	
58,20	4,84	58,28	C4 dihidro indeno	623	773	0,006	C13H18	1428	
34,50	4,14	34,57	1-metil indano*	686	768	0,017	C10H12	1083	1085
34,95	4,21	35,02	1-metil indano*	816	855	0,029	C10H12	1089	1085
8,70	2,48	8,74	Benzeno*	963	963	0,199	C6H6	697	663
12,75	2,94	12,80	Tolueno*	935	935	1,957	C7H8	769	769
18,30	3,34	18,36	etil benzeno*	947	948	0,256	C8H10	861	865
18,90	3,32	18,96	o-xileno*	944	944	0,391	C8H10	870	863
20,25	3,76	20,31	Estireno*	906	935	0,258	C8H8	892	890
20,40	3,55	20,46	p-xileno*	938	938	0,215	C8H10	894	884
22,65	3,47	22,71	1-metil, etil benzeno*	781	899	0,004	C9H12	925	922
24,75	3,58	24,81	propil benzeno*	913	913	0,046	C9H12	953	952
25,50	3,61	25,56	1-etil, 4-metil benzeno*	922	929	0,214	C9H12	963	960
26,85	3,76	26,91	1-metil etil benzeno*	815	825	0,044	C9H12	981	973
27,75	3,77	27,81	1,2,3-trimetil benzeno*	921	925	0,114	C9H12	993	999
30,00	4,00	30,07	1,2,3-trimetil benzeno*	893	893	0,045	C9H12	1023	1023
32,10	3,73	32,16	1-metil, 2-propil benzeno*	771	846	0,027	C10H14	1051	1049

32,40	3,73	32,46	1-metil, 4-propil benzeno*	863	867	0,054	C10H14	1055	1061
32,55	3,74	32,61	butil benzeno*	813	857	0,040	C10H14	1057	1056
32,70	3,76	32,76	m-isopropil tolueno*	578	800	0,014	C10H14	1059	1037
33,30	3,85	33,36	C4 benzeno	590	853	0,011	C10H14	1067	
34,20	3,88	34,26	C4 benzeno	886	887	0,005	C10H14	1079	
34,80	3,90	34,87	1-etil, 2,4-dimetil benzeno*	778	808	0,007	C10H14	1087	1087
36,30	4,11	36,37	C4 benzeno	744	841	0,010	C10H14	1107	
37,35	4,07	37,42	C4 benzeno	658	788	0,035	C10H14	1122	
40,05	3,82	40,11	pentil benzeno*	825	836	0,017	C11H16	1159	1154
54,30	3,88	54,36	C7 benzeno	728	813	0,009	C13H20	1366	
27,60	4,02	27,67	C1 etenil benzeno	724	883	0,025	C9H10	991	
27,90	4,00	27,97	propenil benzeno	907	917	0,075	C9H10	995	
30,30	4,14	30,37	propenil benzeno	913	926	0,063	C9H10	1027	
31,05	4,34	31,12	C1 etenil benzeno	882	884	0,130	C9H10	1037	
38,25	4,25	38,32	C1 propenil benzeno	715	863	0,020	C10H12	1134	
39,45	4,77	39,53	butinil benzeno	894	898	0,157	C10H10	1151	
42,30	4,28	42,37	C2 propenil benzeno	673	778	0,017	C11H14	1191	
42,15	5,46	42,24	Naftaleno*	935	955	0,703	C10H8	1189	1191
51,00	5,66	51,09	1-metil naftaleno*	909	912	0,160	C11H10	1315	1299
56,40	5,39	56,49	1-etil naftaleno*	868	877	0,022	C12H12	1399	1393
56,70	5,58	56,79	2-etil naftaleno*	802	859	0,018	C12H12	1404	1396
57,15	5,36	57,24	2,6-dimetil naftaleno*	842	852	0,043	C12H12	1411	1407
58,35	5,54	58,44	C2 naftaleno	885	903	0,041	C12H12	1431	
59,40	5,61	59,49	C2 naftaleno	568	801	0,015	C12H12	1448	
60,30	5,84	60,40	C2 naftaleno	759	811	0,021	C12H12	1463	
63,30	5,32	63,39	C3 naftaleno	713	837	0,004	C13H14	1511	
39,90	4,81	39,98	dihidro naftaleno	780	850	0,127	C10H10	1157	
40,65	5,05	40,73	1,2-dihidro naftaleno*	938	938	0,103	C10H10	1168	1166
42,60	4,82	42,68	C1 tetrahidro naftaleno	663	688	0,010	C11H14	1195	
51,00	4,80	51,08	C2 tetrahidro naftaleno	751	751	0,217	C12H16	1315	
57,00	4,77	57,08	C3 tetrahidro naftaleno	537	745	0,005	C13H18	1409	
57,45	4,79	57,53	C3 tetrahidro naftaleno	644	784	0,003	C13H18	1416	
55,50	5,67	55,59	Bifenil*	833	865	0,035	C12H10	1385	1382
60,00	6,53	60,11	Bifenileno	625	879	0,011	C12H8	1458	
62,25	6,36	62,36	Acenafteno*	583	879	0,011	C12H10	1494	1489
68,10	6,48	68,21	Fenaleno	867	886	0,027	C13H10	1592	
78,90	7,56	79,03	Antraceno*	766	877	0,002	C14H10	1791	1800
Hidrocarbonetos aromáticos				68 picos	7,471				5,629**
7,80	2,14	7,84	metil ciclopentano	930	930	7,424	C6H12	683	
8,70	2,21	8,74	ciclohexano	945	945	2,207	C6H12	697	
9,00	2,16	9,04	C2 ciclopentano	866	869	0,110	C7H14	701	
35,10	2,86	35,15	C8 ciclopropano	899	899	0,062	C11H22	1091	
8,55	2,06	8,58	HC sat	698	751	0,157	C8H18	694	
35,70	2,75	35,75	HC sat	702	870	0,005	C13H28	1099	
43,05	2,83	43,10	HC sat	869	907	0,014	C13H28	1201	
56,55	2,93	56,60	HC sat	904	907	0,014	C16H34	1401	
62,70	2,99	62,75	HC sat	915	915	0,015	C16H34	1501	
68,55	3,04	68,60	HC sat	819	893	0,008	C16H34	1598	
74,10	3,09	74,15	HC sat	889	889	0,014	C16H34	1701	

79,35	3,14	79,40	HC sat	698	856	0,008	C18H38	1798	
84,45	3,19	84,50	HC sat	788	865	0,003	C19H40	1901	
93,75	3,31	93,81	HC sat	806	854	0,012	C20H42	2101	
98,10	3,37	98,16	HC sat	773	885	0,012	C24H50	2201	
102,30	3,42	102,36	HC sat	681	842	0,004	C20H42	2301	
117,30	3,70	117,36	HC sat	922	922	0,069	C27H56	2651	
124,35	4,21	124,42	HC sat	758	856	0,018	C28H58	2748	
127,05	5,96	127,15	HC sat	910	910	1,396	C27H56	2783	
Hidrocarbonetos saturados				19 picos	11,553				0**
8,10	2,17	8,14	HC ins	573	762	0,151	C6H10	687	
8,25	2,07	8,28	5-metil 2-hexeno*	873	884	1,871	C7H14	690	681
8,55	2,10	8,59	HC ins	883	909	0,956	C7H14	694	
11,55	2,55	11,59	HC ins	919	921	0,071	C7H10	747	
13,95	2,40	13,99	HC ins	836	909	0,005	C8H16	790	
27,60	2,75	27,65	Deceno*	903	903	0,043	C10H20	991	989
42,45	2,94	42,50	Dodeceno*	910	910	0,088	C12H24	1192	1176
42,75	2,95	42,80	dodeceno	656	867	0,004	C12H24	1197	1181
43,35	2,98	43,40	HC ins	807	907	0,005	C12H24	1205	
49,35	3,00	49,40	Trideceno*	908	908	0,085	C13H26	1290	1285
55,95	3,05	56,00	HC ins	913	913	0,090	C14H28	1391	
61,95	3,13	62,00	HC ins	792	858	0,024	C14H28	1489	
62,25	3,10	62,30	HC ins	913	913	0,076	C16H32	1494	
63,00	3,13	63,05	HC ins	758	874	0,010	C14H28	1506	
68,10	3,15	68,15	HC ins	882	882	0,060	C16H32	1591	
73,80	3,19	73,85	HC ins	854	864	0,045	C17H34	1695	
79,05	3,24	79,10	HC ins	918	918	0,049	C18H36	1793	
84,15	3,30	84,21	1-nonadeceno*	793	889	0,010	C19H38	1895	1895
88,80	3,36	88,86	HC ins	884	889	0,034	C20H40	1992	
93,45	3,41	93,51	HC ins	905	911	0,249	C20H40	2094	
8,25	2,26	8,29	C1 ciclopentadieno	876	910	0,078	C6H8	690	
8,40	2,20	8,44	C1 ciclopenteno	947	947	1,257	C6H10	692	
9,30	2,34	9,34	ciclohexeno	929	939	0,284	C6H10	707	
12,30	2,66	12,34	C1 ciclohexadieno	784	959	0,052	C7H10	761	
13,05	2,91	13,10	biciclo heptadiene	759	894	0,109	C7H8	774	
49,20	5,30	49,29	C2 cicloheptatrieno	622	677	0,095	C9H12	1289	
Hidrocarbonetos insaturados				26 picos	5,801			2,101	
8,40	2,47	8,44	C1 dioxolano	923	938	0,035	C4H8O2	692	
10,95	2,56	10,99	2,4,5-trimetil 1,3-dioxolano*	903	934	0,027	C6H12O2	736	745
12,00	2,91	12,05	C2 dioxolano	784	784	0,037	C5H10O2	755	
31,35	5,47	31,44	bidioxolano	711	847	0,019	C6H10O4	1041	
10,20	2,54	10,24	2,5-dimetil furano*	931	940	0,130	C6H8O	723	718
14,55	2,89	14,60	2-etil, 5-metil furano*	819	883	0,003	C7H10O	801	802
7,95	2,00	7,98	2,2-dimetil tetrahidro furano*	606	759	1,222	C6H12O	685	700
12,15	2,90	12,20	metoxi tetrahidro furano	812	825	0,004	C5H10O2	758	
19,50	3,56	19,56	dimetoxi tetrahidro furano	636	816	0,028	C6H12O3	880	
20,55	3,74	20,61	dimetoxi tetrahidro furano	682	831	0,040	C6H12O3	896	
35,70	4,75	35,78	2-metil, benzofurano*	840	840	0,135	C9H8O	1099	1109
36,15	4,73	36,23	C1 benzofurano	898	898	0,483	C9H8O	1105	
42,00	4,80	42,08	C1 benzofurano	799	835	0,017	C10H10O	1187	

43,05	4,80	43,13	C1 benzofurano	884	885	0,408	C10H10O	1201	
43,80	4,79	43,88	C2 benzofurano	812	814	0,159	C10H10O	1212	
44,25	4,81	44,33	4,7-dimetil benzofurano*	834	834	0,224	C10H10O	1218	1220
44,70	4,89	44,78	C2 benzofurano	800	805	0,094	C10H10O	1225	
64,05	6,25	64,15	Dibenzofurano*	856	856	0,005	C12H8O	1524	1521
45,90	5,76	46,00	Bifurano	704	813	0,006	C8H6O2	1242	
54,00	6,45	54,11	C1 furil furano	716	783	0,051	C9H8O2	1362	
47,55	5,85	47,65	metoxi benzofurano	723	881	0,033	C9H8O2	1265	
9,60	2,63	9,64	dimetoxi propeno	578	766	0,551	C5H10O2	712	
9,75	2,72	9,80	C1 isopropoxi propeno	777	777	1,244	C7H14O	715	
35,85	5,75	35,95	metoxi buteno	669	837	0,073	C5H10O	1101	
10,05	2,78	10,10	dihidro dioxina	800	824	0,021	C4H6O2	720	
12,75	3,84	12,81	dihidro dioxina	805	811	0,247	C4H6O2	769	
28,35	4,79	28,43	benzodioxole	758	887	0,013	C7H6O2	1001	
36,45	4,91	36,53	dihidro benzopirano	729	772	0,023	C9H10O	1110	
44,25	5,23	44,34	etenil fenil éter	826	833	1,466	C8H8O	1218	
60,90	3,91	60,97	benzil butil éter	680	839	0,001	C11H16O	1472	
70,95	6,16	71,05	Xanteno*	665	822	0,015	C13H10O	1644	1661
22,05	4,19	22,12	Metoxibenzeno*	909	909	0,068	C7H8O	917	915
29,70	4,37	29,77	4-metil, 1-metoxi benzeno*	865	865	0,110	C8H10O	1019	1019
36,75	4,47	36,82	1-etil, 4-metoxi benzeno*	848	858	0,044	C9H12O	1114	1099
38,70	4,82	38,78	etenil metoxi benzeno	621	818	0,025	C9H10O	1141	
43,50	5,19	43,59	butoxi vinil benzeno	746	769	0,045	C12H16O	1208	
			Éteres	36 picos	7,105			1,984**	
26,70	4,48	26,77	Fenol*	962	962	7,242	C6H6O	979	981
32,10	4,68	32,18	2-metil fenol*	952	952	2,016	C7H8O	1051	1052
33,75	4,69	33,83	4-metil fenol*	952	952	4,750	C7H8O	1073	1077
36,15	4,88	36,23	2,6-dimetil fenol*	942	942	0,438	C8H10O	1105	1106
38,40	4,72	38,48	2-etil fenol*	901	901	0,213	C8H10O	1137	1137
39,15	4,79	39,23	2,4-dimetil fenol*	945	945	0,951	C8H10O	1147	1150
40,35	4,85	40,43	3-etil fenol*	960	966	1,054	C8H10O	1164	1171
40,50	4,87	40,58	4-etil fenol*	911	911	9,704	C8H10O	1166	1166
41,40	5,00	41,48	2,3-dimetil fenol*	874	874	0,060	C8H10O	1178	1181
42,45	5,02	42,53	3,4-dimetil fenol*	924	927	0,112	C8H10O	1193	1195
41,85	4,94	41,93	o-isopropil fenol*	842	853	0,047	C9H12O	1185	1203
43,20	4,92	43,28	2,4,6-trimetil fenol*	879	895	0,024	C9H12O	1203	1203
44,85	4,77	44,93	m-isopropil fenol*	820	886	2,427	C9H12O	1227	1228
45,00	4,74	45,08	p-isopropil fenol*	756	779	0,187	C9H12O	1229	1247
45,30	5,09	45,38	C3 fenol	741	847	0,011	C9H12O	1233	
45,60	4,87	45,68	2-etil, 6-metil fenol*	911	915	0,749	C9H12O	1237	1236
46,65	5,09	46,73	4-propenil fenol*	843	862	0,240	C9H10O	1252	1254
46,95	4,83	47,03	4-propil fenol*	932	932	0,288	C9H12O	1256	1260
47,70	5,00	47,78	C3 fenol	841	841	0,081	C9H12O	1267	
48,30	5,07	48,38	C3 fenol	663	854	0,021	C9H12O	1276	
48,45	4,89	48,53	C4 fenol	782	861	0,005	C10H14O	1278	
49,50	4,92	49,58	C4 fenol	867	870	0,069	C10H14O	1293	
50,70	4,80	50,78	C4 fenol	790	817	0,135	C10H14O	1311	
51,60	5,09	51,68	C1 alil fenol	675	770	0,022	C10H12O	1325	
51,75	4,82	51,83	2-metil, 6-propil fenol*	844	855	0,032	C10H14O	1327	1320

53,85	4,85	53,93	C4 fenol	704	841	0,004	C10H14O	1359	
75,00	7,29	75,12	fenil fenol*	812	820	0,033	C12H10O	1719	1717
47,10	5,42	47,19	3-metil, 1,2-benzenodiol*	912	912	0,133	C7H8O2	1259	1263
48,45	6,05	48,55	benzenodiol	882	889	0,308	C6H6O2	1278	
49,20	5,37	49,29	Catecol*	749	763	0,072	C7H8O2	1289	1294
52,80	6,27	52,90	C1 benzenodiol	692	891	0,049	C7H8O2	1343	
55,50	5,45	55,59	4-etil catecol*	864	874	0,193	C8H10O2	1385	1392
58,80	6,10	58,90	dihidro naftalenol	732	831	0,019	C10H10O	1438	
60,30	6,15	60,40	dihidro naftalenol	746	844	0,026	C10H10O	1463	
64,05	6,94	64,17	2-naftalenol*	716	870	0,011	C10H8O	1524	1521
69,75	7,20	69,87	C1 naftalenol	701	801	0,018	C11H10O	1622	
71,25	7,11	71,37	C1 naftalenol	535	801	0,018	C11H10O	1649	
52,65	5,76	52,75	dihidro indenol	857	859	0,081	C9H10O	1341	
52,65	5,43	52,74	2,3-dihidro indenol*	777	809	0,117	C9H10O	1341	1335
53,70	6,16	53,80	Indenol	846	851	0,118	C9H8O	1357	
55,80	5,53	55,89	C1 indanol	567	781	0,014	C10H12O	1390	
			Fenóis	41 picos	32,091			31,092**	
7,95	2,32	7,99	propanoato de metila	938	938	0,193	C4H8O2	685	
10,80	2,64	10,84	butanoato de metila*	882	882	0,063	C5H10O2	734	735
25,20	4,70	25,28	propanoato de etenila	940	973	0,063	C5H8O2	959	
32,70	4,91	32,78	etanoato de fenila*	837	837	0,062	C8H8O2	1059	1068
38,40	4,89	38,48	C1 etanoato de fenila	617	878	0,013	C9H10O2	1137	
40,80	4,96	40,88	4-metil etanoato de fenila*	906	907	0,081	C9H10O2	1170	1166
47,55	4,93	47,63	C2 metanoato de fenila	872	872	0,086	C10H12O2	1265	
50,55	5,33	50,64	4-alil metanoato de fenila*	835	844	0,152	C11H12O2	1308	1313
85,65	3,84	85,71	C1 pentadecanoato de metila	861	879	0,019	C17H34O2	1926	
10,50	2,73	10,55	3-butenoato de metila*	645	863	0,001	C5H8O2	728	710
11,25	2,83	11,30	butenoato de metila	792	868	0,005	C5H8O2	742	
12,60	3,05	12,65	2-butenoato de metila*	905	905	0,031	C5H8O2	766	756
16,80	3,79	16,86	pentenoato de etila	698	751	0,100	C7H12O2	837	
25,50	4,69	25,58	oxalato (di) isobutila	850	880	0,034	C10H18O4	963	
30,75	6,05	30,85	C4 oxalato ciclohexila	639	881	0,038	C12H20O4	1033	
32,85	5,55	32,94	furanocarboxilato de ciclobutila	783	789	0,008	C9H10O3	1061	
44,40	4,72	44,48	hidroxi fenil acetato de etila	804	811	0,024	C10H12O3	1220	
53,10	5,13	53,19	hidroxi benzenoacetato de metila	688	798	0,003	C9H10O3	1348	
35,40	4,93	35,48	benzenoato de metila*	717	806	0,017	C8H8O2	1095	1096
9,75	2,64	9,79	butil glioxilate	871	910	1,722	C6H10O3	715	
18,00	3,54	18,06	metil etil carbamato	691	729	0,161	C4H9NO2	856	
			Ésteres	21 picos	2,876			0,407	
7,95	2,15	7,99	ácido acético*	945	986	2,906	C2H4O2	685	665
9,60	2,69	9,64	ácido propanóico*	870	870	4,382	C3H6O2	712	700
11,85	2,66	11,89	2-metil ácido butanoico*	845	848	0,074	C4H8O2	753	732
13,50	3,01	13,55	ácido butanoico*	852	863	0,968	C4H8O2	782	789
16,65	2,96	16,70	3-metil ácido butanoico*	868	868	0,012	C5H10O2	834	834
17,25	2,97	17,30	2-metil ácido butanoico*	791	888	0,009	C5H10O2	844	846
18,90	3,25	18,95	ácido pentanoico	752	843	0,037	C5H8O2	870	
19,35	3,18	19,40	ácido pentanoico*	901	901	0,072	C5H10O2	877	879
19,95	3,32	20,01	ácido pentanoico	886	889	0,024	C5H8O2	887	
22,05	3,60	22,11	ácido pentanoico	891	891	0,093	C5H8O2	917	

26,25	3,40	26,31	ácido hexanóico*	895	895	0,029	C6H12O2	973	977
33,45	3,52	33,51	ácido heptanóico*	733	859	0,008	C7H14O2	1069	1071
87,15	4,05	87,22	ácido hexadecanóico*	844	857	0,047	C16H32O2	1958	1958
16,35	4,01	16,42	ácido butanóico anidrido	932	963	0,012	C8H14O3	830	
13,80	2,91	13,85	ácido butenoico	740	791	0,011	C4H6O2	788	
13,95	3,09	14,00	ácido butenóico	917	921	0,143	C4H6O2	790	
15,75	3,33	15,81	ácido butenóico	913	913	0,196	C4H6O2	820	
			Ácidos carboxílicos	17 picos	9,022			8,506	
8,70	2,45	8,74	2-metil butanal*	546	750	0,199	C5H10O	697	677
18,00	4,90	18,08	Heptanal	854	857	0,023	C8H16O	856	
130,35	6,14	130,45	octadecanal	787	787	0,091	C18H36O		
12,00	3,50	12,06	hidroxi butanal	966	966	0,099	C4H8O2	756	
22,05	4,14	22,12	C1 hidroxi pentanal	593	719	0,021	C6H12O2	917	
8,85	2,63	8,89	Butenal	913	922	0,010	C4H6O	699	
8,85	2,53	8,89	Pentenal	724	805	0,091	C5H8O	699	
11,55	3,05	11,60	2-metil 2-butenal*	903	903	0,294	C5H8O	747	749
13,20	4,09	13,27	pentenal	855	855	0,008	C5H8O	777	
18,75	4,39	18,82	2,4-hexadienal*	838	840	0,241	C6H8O	868	879
50,25	5,78	50,35	fenil propenal	788	873	0,016	C9H8O	1304	
57,15	6,61	57,26	C1 fenil propenal	670	751	0,024	C10H10O	1412	
15,15	4,08	15,22	3-furaldeído*	931	931	0,175	C5H4O2	811	815
16,35	4,41	16,42	Furfural*	965	965	4,466	C5H4O2	830	834
32,40	5,08	32,48	C2 furaldeido	839	867	0,021	C7H8O2	1055	
25,35	5,08	25,43	5-metil 2-furanocarboxaldeído*	947	947	2,409	C6H6O2	961	965
24,30	4,44	24,37	ciclohexeno carboxaldeido	637	784	0,004	C7H10O	947	
			hidroxi tetrahidro naftaleno						
54,90	5,26	54,99	carboxaldeido	637	787	0,008	C11H12O2	1376	
25,20	5,01	25,28	Benzaldeído*	947	947	0,334	C7H6O	959	968
33,30	5,16	33,39	3-metil benzaldeído*	914	915	0,054	C8H8O	1067	1059
34,35	5,23	34,44	4-metil benzaldeído*	872	875	0,095	C8H8O	1081	1079
42,15	5,31	42,24	3-etil, benzaldeído*	552	739	0,216	C9H10O	1189	1168
31,50	5,18	31,59	2-hidroxi benzaldeído*	913	913	0,061	C7H6O2	1043	1057
38,25	5,06	38,33	C1 hidroxi benzaldeído	803	887	0,047	C8H8O2	1135	
39,90	5,19	39,99	C1 hidroxi benzaldeído	865	888	0,025	C8H8O2	1157	
53,55	6,28	53,65	etilideno benzenoacetaldeído	741	750	0,047	C10H10O	1355	
57,45	6,72	57,56	etilideno benzenoacetaldeído	663	746	0,029	C10H10O	1416	
54,15	6,36	54,26	hidroxi benzenoacetaldeído	754	754	0,144	C8H6O3	1364	
55,35	6,00	55,45	hidroxi benzenoacetaldeído	705	741	0,074	C9H8O3	1383	
			Aldeídos	29 picos	9,327			8,544	
48,75	6,69	48,86	dihidro indenona	949	953	0,213	C9H8O	1282	
50,55	6,06	50,65	C1 dihidro indenona	696	762	0,051	C10H10O	1309	
51,30	6,22	51,40	C1 dihidro indenona	796	853	0,009	C10H10O	1320	
56,25	6,47	56,36	C1 indanona	782	822	0,021	C10H10O	1397	
13,95	3,80	14,01	Ciclopentanona*	962	962	0,509	C5H8O	791	797
16,80	3,83	16,86	2-metil ciclopentanona*	854	872	0,054	C6H10O	837	836
17,25	3,90	17,32	3-metil ciclopentanona*	940	940	0,036	C6H10O	844	848
20,40	4,48	20,47	Ciclohexanona*	913	913	0,024	C6H10O	894	894
23,55	4,33	23,62	C2 ciclopentenona	754	754	0,108	C7H10O	937	
35,85	5,39	35,94	C1 etenil ciclopentanona	738	765	0,037	C8H12O	1101	

31,50	7,00	31,62	ciclopropil propanona	776	831	0,031	C6H10O	1044	
16,35	4,67	16,43	2-ciclopenten-1-ona*	932	932	1,967	C5H6O	830	835
21,30	4,66	21,38	2-metil 2-ciclopenten-1-ona*	960	960	1,662	C6H8O	907	910
23,10	5,13	23,19	2-ciclohexen-1-ona*	936	936	0,193	C6H8O	931	939
25,50	5,34	25,59	3-metil 2-ciclopenten-1-ona*	930	930	0,837	C6H8O	963	973
27,60	4,86	27,68	C2 ciclopentenona	862	869	0,116	C7H10O	991	
27,90	4,87	27,98	C1 ciclohexenona	851	853	0,165	C7H10O	995	
28,05	4,79	28,13	C2 ciclopentenona	845	845	0,173	C7H10O	997	
29,70	5,15	29,79	C2 ciclopentenona	737	777	0,034	C7H10O	1019	
30,15	5,03	30,23	C2 ciclopenten-1-ona	657	713	0,046	C7H10O	1025	
31,05	5,15	31,14	2,3-dimetil 2-ciclopenten-1-ona*	865	865	0,305	C7H10O	1037	1040
33,00	4,64	33,08	C3 ciclopentenona	748	838	0,042	C8H12O	1063	
33,90	5,41	33,99	3-etil 2-ciclopenten-1-ona*	841	869	0,172	C7H10O	1075	1082
34,95	4,91	35,03	2,3,4-trimetil 2-ciclopenten-1-ona*	762	799	0,028	C8H12O	1089	1071
35,85	5,00	35,93	C2 ciclohexadienona	763	807	0,024	C8H10O	1101	
36,00	4,93	36,08	C3 ciclopentenona	779	798	0,037	C8H12O	1103	
36,75	5,58	36,84	C2 ciclohexenona	726	791	0,000	C8H12O	1114	
38,10	5,07	38,18	C3 ciclopentenona	750	750	0,020	C8H12O	1132	
37,05	5,04	37,13	C2 hidroxil ciclopentenona	803	866	0,034	C7H10O2	1118	
19,80	5,09	19,88	2-ciclopenteno-1,4-diona*	876	878	0,025	C5H4O2	885	884
30,15	5,09	30,23	3-metil 1,2-ciclopentanodiona*	907	907	0,417	C6H8O2	1025	1043
30,30	5,72	30,40	Ciclohexenodiona	834	858	0,109	C6H6O2	1027	
32,40	5,46	32,49	2-ciclohexeno-1,4-diona*	779	803	0,030	C6H6O2	1055	1032
8,55	2,45	8,59	3-metil 2-butanona*	768	851	0,018	C5H10O	694	673
13,65	2,97	13,70	3-hexanona*	841	841	0,017	C6H12O	785	784
31,50	5,99	31,60	Nonanona	787	862	0,031	C9H18O	1043	
18,60	4,49	18,67	1-acetiloxil 2-propanona*	907	947	0,133	C5H8O3	866	862
14,40	3,09	14,45	3,4-hexanodiona*	885	924	0,005	C6H10O2	798	800
46,80	5,19	46,89	C3 pentanodiona	621	865	0,065	C8H14O2	1254	
48,75	5,55	48,84	C3 pentanodiona	763	882	0,023	C8H14O2	1282	
10,20	3,00	10,25	3-hidroxil 2-butanona*	975	975	0,051	C4H8O2	723	720
12,75	3,50	12,81	1-hidroxil 2-butanona*	940	940	0,196	C4H8O2	769	748
15,75	3,76	15,81	4-hidroxil 2-pentanona*	775	796	0,107	C5H10O2	820	818
9,45	2,65	9,49	Pentenona	805	891	0,145	C5H8O	710	
11,55	3,09	11,60	3-penten-1-ona*	977	977	0,255	C5H8O	747	735
12,90	2,97	12,95	C1 pentenona	749	922	0,177	C6H10O	771	
16,80	3,53	16,86	Hexenona	834	896	0,129	C6H10O	837	
16,95	3,58	17,01	3-hexen-2-ona*	930	933	0,096	C6H10O	839	834
26,85	4,62	26,93	Heptadienona	578	772	0,013	C7H10O	981	
27,60	4,37	27,67	heptadienona	743	768	0,005	C7H10O	991	
33,15	5,11	33,24	Octenona	735	739	0,022	C8H14O	1065	
34,35	4,89	34,43	nonadienona	675	683	0,040	C9H14O	1081	
21,00	4,54	21,08	furânil etanona	887	887	0,028	C6H6O2	903	
21,60	4,68	21,68	2-furânil etanona*	948	948	0,770	C6H6O2	911	914
30,90	5,05	30,98	C1 furânil etanona	821	862	0,035	C7H8O2	1035	
28,80	4,81	28,88	2-furânil 2-propanona*	862	862	0,016	C7H8O2	1007	1008
37,95	4,99	38,03	5-metil, 2-furânil 1-propanona*	756	874	0,000	C8H10O2	1130	1108
40,80	4,88	40,88	5-metil, 2-furânil 2-butanona*	737	808	0,055	C9H12O2	1170	1160
33,15	5,35	33,24	Acetofenona*	921	921	0,188	C8H8O	1065	1075

38,55	5,13	38,64	3-metil acetofenona*	771	887	0,021	C9H10O	1139	1157
41,10	5,28	41,19	m-metil acetofenona*	831	834	0,057	C9H10O	1174	1183
40,35	5,47	40,44	o-hidroxi acetofenona*	861	883	0,064	C8H8O2	1164	1167
54,00	5,12	54,09	C2 hidroxí acetofenona	732	786	0,006	C10H12O2	1362	
22,20	6,48	22,31	2(5H)-furanona*	949	949	0,306	C4H4O2	920	918
23,55	5,97	23,65	5-metil 2(5H)-furanona*	877	877	0,339	C5H6O2	937	938
26,55	6,24	26,65	C1 furanona	849	851	0,270	C5H6O2	977	
23,85	5,80	23,95	3-metil 2,5-furanodiona*	759	787	0,020	C5H4O3	941	949
26,55	4,02	26,62	C2 dihidroxí furanona	836	848	0,008	C6H8O4	977	
21,75	6,46	21,86	dihidro 2(3H)-furanona*	961	976	0,314	C4H6O2	914	915
24,30	5,92	24,40	C1 dihidro furanona	690	845	0,010	C5H8O2	947	
24,75	5,93	24,85	5-metil dihidro 2(3H)-furanona*	680	892	0,017	C5H8O2	953	950
28,20	5,56	28,29	C2 dihidro furanona	855	855	0,047	C6H8O2	999	
50,85	6,14	50,95	Benzofuranona	755	792	0,029	C8H6O2	1313	
69,75	7,87	69,88	C2 dihidro benzofuranodiona	773	827	0,083	C10H8O3	1622	
26,10	6,35	26,21	2H-piran-2-ona*	900	902	0,473	C5H4O2	971	973
30,90	7,28	31,02	dihidro piranona	916	946	0,006	C5H6O2	1036	
36,75	5,72	36,85	3-metil, 3-hidroxi 4-pirona*	777	847	0,034	C6H6O3	1114	1114
59,25	7,78	59,38	1,2-benzopiranona*	624	841	0,015	C9H6O2	1446	1432
28,05	4,62	28,13	benzociclobutenona	907	907	0,804	C8H6O	997	
37,80	5,44	37,89	fenil 2-propanona*	855	887	0,024	C9H10O	1128	1110
54,30	5,68	54,39	hidroxí benzilideno	637	749	0,008	C10H10O2	1367	
65,85	6,68	65,96	acenaftilenona	729	828	0,015	C12H8O	1554	
			Cetonas	82 picos	13,123			9,849**	
11,70	2,96	11,75	metoxi metil nitroso metanamina	811	942	0,009	C3H8N2O2	750	
16,50	3,53	16,56	Triazol	888	995	0,052	C2H3N3	832	
18,45	4,37	18,52	C2 hidrazina	831	898	0,024	C2H8N2	863	
22,80	4,68	22,88		706	764	0,007	CH6N4	927	
23,85	4,72	23,93	C1 etanodiamina	713	877	0,013	C3H10N2	941	
25,65	5,37	25,74	C1 dihidro imidazol	614	817	0,050	C4H8N2	965	
72,60	6,93	72,72	C1 hidroxí propanoamina	600	711	0,023	C10H15NO	1674	
12,75	3,77	12,81	formamida	735	742	0,105	C3H6N2O2	769	
30,75	5,99	30,85	C1 piridazinona	799	815	0,071	C5H6N2O	1033	
45,15	5,61	45,24	matacetamol	774	992	0,034	C8H9NO2	1231	
10,80	3,03	10,85	C1 butanonitrila	824	875	0,019	C5H9N	734	
27,00	5,28	27,09	Benzonitrila*	793	857	0,003	C7H5N	983	983
38,55	6,27	38,65	benzil nitrila*	872	872	0,023	C8H7N	1139	1137
			Compostos nitrogenados	13 picos	0,434			0,026**	
12,15	3,18	12,20	ciclotutenil etanol	829	829	0,002	C5H8O	758	
12,75	3,24	12,80	Hexanol	691	826	0,029	C6H14O	769	
14,25	3,02	14,30	hexadienol	878	885	0,020	C6H10O	796	
21,90	4,57	21,98	furanodimetanol	686	686	0,214	C6H8O3	915	
45,60	4,92	45,68	benzenodimetanol	749	789	0,353	C8H10O2	1237	
			Álcoois	4 picos	0,618				
30,90	6,03	31,00	arabinose	522	645	0,039	C5H10O5	1035	
43,50	6,93	43,62	dianidro glucopiranoze	743	743	0,051	C6H8O4	1208	
61,20	8,40	61,34	anidro glucopiroze (levoglucosan)	858	860	0,481	C6H10O5	1478	
64,35	7,12	64,47	anidro glucopiroze (levoglucosano)	555	860	0,009	C6H10O5	1529	
			Açúcares	4 picos	0,580			0**	

Total **361 picos** **100,0** **68,138**

(¹⁺²t_R)^a: soma do tempo de retenção nas duas dimensões em minutos (soma do tempo da ¹D com o tempo da ²D); S^b: similaridade da biblioteca; R^c: similaridade modo reversa da biblioteca; A^d: área percentual calculada; LTPRI^e: índice retenção: IR_{calc.}=índice de retenção calculado para cada composto, IR_{lit.}= índice de retenção teórico referente à literatura (NIST).

* Identificação confirmada pelo LTPRI. A identificação dos demais compostos foi somente por comparação com os espectros da biblioteca do GCxGC/TOFMS (biblioteca Nist) e análise detalhada de cada espectro, não especificando as posições das ramificações e insaturações.;

**Soma das áreas percentuais dos compostos positivamente pelo LTPRI

Tabela 2: Identificação dos compostos da fração BOF1+F2 do bio-óleo bruto não catalítico do bagaço da cana-de-açúcar (BO BC) por GCxGC/TOFMS.

¹ t _R (min)	² t _R (s)	¹⁺² t _R (min) ^a	Nome	S ^b	R ^c	A (%) ^d	Fórmula	LTPRI ^e	
								IR cal.	IR lit.
13,00	2,94	13,05	Tolueno*	953	953	6,535	C7H8	773	769
18,40	3,34	18,46	etil, benzeno*	919	919	0,108	C8H10	862	865
19,00	3,33	19,06	o-xileno*	944	944	0,102	C8H10	872	863
20,65	3,53	20,71	p-xileno*	813	842	0,020	C8H10	898	884
67,00	3,96	67,07	nonil, benzeno*	688	824	0,009	C15H24	1573	1573
72,85	4,01	72,92	decil, benzeno*	844	844	0,038	C16H26	1678	1678
73,15	4,06	73,22	C6 benzeno	775	834	0,014	C12H18	1684	
74,35	3,96	74,42	C11 benzeno	733	848	0,009	C17H28	1706	
74,80	3,96	74,87	C11 benzeno	690	773	0,012	C17H28	1714	
78,10	4,05	78,17	C11 benzeno	749	762	0,004	C17H28	1775	
78,40	4,05	78,47	C11 benzeno	889	889	0,120	C17H28	1781	
78,70	4,10	78,77	C11 benzeno	794	808	0,056	C17H28	1786	
82,90	4,08	82,97	C12 benzeno	731	735	0,021	C18H30	1870	
83,80	4,09	83,87	C12 benzeno	869	869	0,164	C18H30	1888	
83,95	4,16	84,02	C12 benzeno	819	819	0,044	C18H30	1891	
85,00	4,04	85,07	C13 benzeno	836	839	0,030	C19H32	1913	
88,45	4,15	88,52	C13 benzeno	792	794	0,003	C19H32	1985	
89,05	4,20	89,12	C13 benzeno	770	798	0,030	C19H32	1997	
89,95	4,09	90,02	C13 benzeno	783	792	0,011	C19H32	2017	
93,55	4,21	93,62	C14 benzeno	869	871	0,113	C20H34	2097	
97,75	4,27	97,82	C15 benzeno	668	752	0,015	C21H36	2193	
98,05	4,27	98,12	C16 benzeno	815	829	0,085	C22H38	2200	
102,40	4,33	102,47	C16 benzeno	860	871	0,061	C17H28	2304	
102,70	4,39	102,77	C16 benzeno	730	732	0,047	C22H38	2312	
106,60	4,40	106,67	C17 benzeno	850	851	0,073	C23H40	2412	
118,15	4,62	118,23	C19 benzeno	792	792	0,050	C25H44	2663	
121,60	4,83	121,68	C19 benzeno	779	779	0,066	C25H44	2712	
125,50	5,54	125,59	C20 benzeno	789	800	0,087	C26H46	2763	
31,75	4,66	31,83	1-propinil, benzeno*	628	856	0,020	C9H8	1046	1058
40,00	4,82	40,08	butinil benzeno	731	881	0,022	C10H10	1159	
50,95	4,81	51,03	C4 etenil benzeno	825	827	0,095	C11H12O	1314	
39,55	4,74	39,63	1-metil,1H-indeno*	901	903	0,034	C10H10	1153	1172
47,50	4,84	47,58	C2 indeno	696	875	0,019	C11H12	1264	
47,95	4,89	48,03	C2 indeno	692	850	0,012	C11H12	1271	
49,90	5,41	49,99	etilideno, indeno	839	861	0,023	C11H10	1298	
82,90	7,29	83,02	metileno fenil indeno	753	940	0,021	C16H12	1871	
83,20	7,04	83,32	fenil indeno	824	874	0,025	C15H12	1877	

82,00	4,63	82,08	hexil dihidro indeno	712	796	0,006	C15H22	1852	
51,10	5,62	51,19	1-metil, naftaleno*	868	871	0,038	C11H10	1317	1299
56,50	5,38	56,59	1-etil, naftaleno*	727	851	0,014	C12H12	1401	1393
56,65	5,60	56,74	2-etil, naftaleno*	637	846	0,010	C12H12	1403	1396
57,25	5,32	57,34	1,7-dimetil, naftaleno*	802	920	0,042	C12H12	1413	1419
57,40	4,80	57,48	C3 tetrahidro naftaleno	616	806	0,014	C13H18	1415	
58,15	5,54	58,24	2,3-dimetil, naftaleno*	868	868	0,120	C12H12	1428	1446
59,35	5,62	59,44	1,4-dimetil, naftaleno*	818	875	0,040	C12H12	1447	1443
60,40	5,82	60,50	1,2-dimetil, naftaleno*	859	863	0,125	C12H12	1464	1459
64,60	5,46	64,69	C3 naftaleno	765	783	0,024	C13H14	1533	
64,90	5,46	64,99	C3 naftaleno	891	908	0,033	C13H14	1538	
65,95	5,61	66,04	1,6,7-trimetil, naftaleno*	829	829	0,057	C13H14	1556	1572
66,85	5,67	66,94	C3 naftaleno	802	802	0,037	C13H14	1571	
67,00	5,74	67,10	C3 naftaleno	779	821	0,027	C13H14	1573	
67,90	5,94	68,00	C3 naftaleno	773	836	0,016	C13H14	1588	
68,35	5,95	68,45	C3 naftaleno	801	814	0,013	C13H14	1596	
69,10	6,32	69,21	isopronenil naftaleno	824	824	0,056	C13H12	1609	
69,40	6,05	69,50	C3 naftaleno	830	834	0,020	C13H14	1615	
69,55	6,42	69,66	isopronenil naftaleno	862	866	0,026	C13H12	1618	
70,90	5,92	71,00	C4 naftaleno	730	732	0,056	C14H16	1643	
73,00	5,56	73,09	C4 naftaleno	612	751	0,024	C14H16	1681	
76,45	6,09	76,55	C4 naftaleno	713	827	0,200	C14H16	1745	
79,60	5,37	79,69	hexil naftaleno	797	822	0,015	C16H20	1804	
80,20	5,26	80,29	C6 naftaleno	806	812	0,011	C16H20	1816	
83,35	6,34	83,46	C3 propenil naftaleno	641	682	0,018	C16H18	1880	
88,30	7,59	88,43	2-fenil, naftaleno*	816	831	0,053	C16H12	1983	1987
86,95	4,48	87,02	C9 tetrahidro naftaleno	640	810	0,004	C19H30	1954	
55,45	5,68	55,54	Bifenil*	816	868	0,034	C12H10	1384	1382
62,20	5,58	62,29	4-metil, 1,1-bifenila*	875	887	0,028	C13H12	1493	1492
62,65	5,67	62,74	3-metil, 1,1-bifenila*	752	894	0,012	C13H12	1501	1488
75,55	6,26	75,65	C2 bifenil	737	852	0,022	C14H14	1729	
77,65	6,63	77,76	C2 bifenil	749	813	0,013	C14H14	1768	
81,10	5,87	81,20	C4 bifenil	674	761	0,026	C16H18	1834	
68,05	6,50	68,16	Fluoreno*	927	927	0,484	C13H10	1591	1588
69,25	6,27	69,35	C1 fluoreno	829	829	0,104	C14H12	1612	
74,35	6,36	74,46	C1 fluoreno	832	832	0,083	C14H12	1707	
74,95	6,53	75,06	2-metil, 9H fluoreno*	911	911	0,351	C14H12	1718	1719
75,40	6,12	75,50	C2 fluoreno	879	882	0,058	C15H14	1726	
75,55	6,70	75,66	1-metil, 9H-fluoreno*	906	920	0,222	C14H12	1729	1719
76,15	6,37	76,26	C2 fluoreno	808	852	0,039	C15H14	1740	
76,75	6,69	76,86	C1 fluoreno	884	890	0,032	C14H12	1751	
77,20	6,76	77,31	C1 fluoreno	886	914	0,030	C14H12	1759	
77,80	6,90	77,92	C1 fluoreno	813	822	0,012	C14H12	1771	
78,25	7,07	78,37	C1 fluoreno	798	843	0,030	C14H12	1779	
79,90	6,40	80,01	C2 fluoreno	817	817	0,144	C15H14	1810	
80,95	6,42	81,06	C2 fluoreno	867	872	0,213	C15H14	1831	
82,00	6,69	82,11	C2 fluoreno	874	877	0,221	C15H14	1853	
82,90	6,74	83,01	C2 fluoreno	760	814	0,106	C15H14	1871	
83,35	6,87	83,46	C2 fluoreno	797	898	0,136	C15H14	1880	

84,40	6,24	84,50	C3 fluoreno	679	815	0,032	C16H16	1901	
98,05	8,27	98,19	Benzofluoreno	880	884	0,065	C17H12	2202	
99,25	8,69	99,39	Benzofluoreno	880	931	0,167	C17H12	2231	
100,00	8,73	100,15	Benzofluoreno	857	890	0,020	C17H12	2249	
100,15	8,89	100,30	Benzofluoreno	876	912	0,018	C17H12	2252	
80,65	6,38	80,76	C1 dihidro antraceno	822	823	0,158	C15H14	1825	
86,50	6,33	86,61	C2 dihidro antraceno	657	817	0,011	C16H16	1945	
87,70	6,59	87,81	C2 dihidro antraceno	624	706	0,024	C16H16	1970	
89,65	6,91	89,77	C3 dihidro antraceno	668	839	0,009	C17H18	2011	
93,85	7,89	93,98	9,10- dimetil antraceno*	896	896	0,092	C16H14	2105	2108
100,30	8,02	100,43	C3 antraceno	658	743	0,009	C17H16	2255	
101,20	8,69	101,34	propenil antraceno	792	853	0,040	C17H14	2277	
109,15	9,86	109,16	Benzoantraceno*	901	923	0,008	C18H12	2476	2453
78,85	7,59	78,98	Fenantreno*	949	951	0,633	C14H10	1790	1790
84,70	7,33	84,82	C1 fenantreno	921	928	0,263	C15H12	1908	
85,00	7,44	85,12	C1 fenantreno	933	942	0,305	C15H12	1914	
85,45	7,38	85,57	C1 fenantreno	928	928	0,059	C15H12	1923	
85,90	7,69	86,03	C1 fenantreno	905	905	0,237	C15H12	1933	
85,90	7,93	86,03	ciclopentafenantreno	910	910	0,090	C15H10	1933	
86,20	7,71	86,33	1-metil, fenantreno*	917	929	0,307	C15H12	1939	1944
89,20	7,17	89,32	C2 fenantreno	868	868	0,029	C16H14	2001	
90,10	7,13	90,22	C2 fenantreno	799	816	0,032	C16H14	2021	
90,55	7,22	90,67	C2 fenantreno	852	852	0,114	C16H14	2031	
90,70	7,34	90,82	C2 fenantreno	829	831	0,024	C16H14	2035	
91,30	7,44	91,42	C2 fenantreno	896	898	0,312	C16H14	2048	
91,60	7,50	91,73	C2 fenantreno	883	891	0,257	C16H14	2055	
95,50	7,24	95,62	C3 fenantreno	675	799	0,033	C17H16	2143	
96,40	7,29	96,52	C3 fenantreno	836	841	0,026	C17H16	2164	
96,70	7,30	96,82	C3 fenantreno	792	817	0,026	C17H16	2170	
97,45	7,50	97,58	C3 fenantreno	714	787	0,009	C17H16	2188	
99,40	7,15	99,52	C4 fenantreno	816	852	0,031	C18H18	2234	
92,20	8,00	92,33	dihidro pireno	795	799	0,044	C16H12	2068	
95,20	9,11	95,20	Pireno*	893	893	0,714	C16H10	2133	2133
101,50	9,20	101,50	C1 pireno	928	928	0,294	C17H12	2281	
101,80	9,23	101,80	C1 pireno	909	909	0,155	C17H12	2288	
104,20	8,49	104,34	C2 pireno	782	832	0,157	C18H14	2352	
106,00	8,89	106,15	C2 pireno	802	874	0,028	C18H14	2398	
106,30	8,96	106,45	C2 pireno	617	729	0,029	C18H14	2406	
107,80	9,26	107,80	C2 pireno	811	853	0,030	C18H14	2441	
59,95	6,55	60,06	Acenaftileno*	881	889	0,042	C12H8	1457	1456
62,20	6,37	62,31	Acenafteno*	937	937	0,053	C12H10	1494	1489
70,45	6,82	70,56	Fenaleno	888	909	0,079	C13H10	1634	
88,90	6,72	89,01	C4 acenaftileno	668	822	0,052	C16H16	1995	
93,70	8,75	93,85	Fluoranteno*	855	878	0,020	C16H10	2102	2084
103,60	4,08	103,67	C1 fenil pentadecano	804	855	0,006	C22H38	2335	
	10,1								
109,60	8	109,62	trifenileno	800	832	0,018	C18H12	2487	
110,20	8,71	110,35	dihidro naftaceno	575	728	0,040	C18H14	2506	
								10,367*	
								*	
Hidrocarbonetos aromáticos				133	picos	16,901			

10,15	2,11	10,19	heptano	930	930	0,257	C7H16	722	
10,90	2,20	10,94	2,2,3,3-tetrametil, butano*	907	907	0,018	C8H18	735	720
11,35	2,21	11,39	HC sat	845	867	0,050	C9H20	743	
12,85	2,27	12,89	2-metil, heptano*	809	913	0,054	C8H18	770	765
13,30	2,30	13,34	3-metil, heptano*	675	866	0,019	C8H18	778	773
20,95	2,51	20,99	Nonano	701	881	0,009	C9H20	902	
28,30	2,64	28,34	Decano	668	839	0,005	C10H22	1000	
56,50	2,94	56,55	Tetradecano	859	878	0,009	C14H30	1400	
62,65	3,00	62,70	hexadecano	926	931	0,053	C16H34	1500	
68,50	3,05	68,55	HC sat C16	915	915	0,092	C16H34	1597	
71,35	2,97	71,40	HC sat C16	841	877	0,005	C16H34	1650	
74,05	3,11	74,10	HC sat C17	917	917	0,300	C17H36	1700	
74,80	2,91	74,85	HC sat C17	686	851	0,007	C17H36	1714	
79,45	3,14	79,50	HC sat C18	886	886	0,466	C18H38	1800	
79,90	3,04	79,95	HC sat C19	854	854	0,034	C19H40	1809	
82,60	3,15	82,65	HC sat C18	719	833	0,022	C18H38	1864	
84,40	3,21	84,45	nonadecano	908	908	1,216	C19H40	1900	
85,75	2,98	85,80	HC sat C20	814	847	0,010	C20H42	1928	
87,70	3,04	87,75	HC sat C20	863	866	0,014	C20H42	1969	
89,20	3,27	89,25	HC sat C20	899	899	1,000	C20H42	2000	
93,70	3,33	93,76	HC sat C21	902	902	0,837	C21H44	2100	
98,05	3,38	98,11	HC sat	908	908	1,390	C21H44	2200	
107,65	3,49	107,71	HC sat	718	878	0,033	C20H42	2438	
110,05	3,59	110,11	HC sat C25	905	905	3,629	C24H50	2500	
111,40	3,55	111,46	HC sat	807	828	0,059	C27H56	2536	
117,25	3,75	117,31	HC sat C27	955	959	6,491	C27H56	2650	
119,80	3,77	119,86	HC sat C27	800	819	0,018	C27H56	2687	
124,30	4,25	124,37	HC sat C29	920	920	2,073	C29H60	2747	
11,05	2,36	11,09	metil, ciclohexano*	897	897	0,446	C7H14	738	736
11,50	2,37	11,54	etil, ciclopentano*	678	818	0,040	C7H14	746	736
11,80	2,30	11,84	C3 ciclopentano	785	811	0,054	C8H16	752	
11,95	2,57	11,99	C1 ciclohexadieno	908	942	0,405	C7H10	754	
12,10	2,34	12,14	1,2,3- trimetil, ciclopentano*	799	884	0,023	C8H16	757	748
67,75	3,16	67,80	C2 ciclooctano	794	845	0,026	C10H20	1585	
87,85	3,63	87,91	C15 ciclohexano	706	772	0,034	C21H42	1972	
92,65	3,68	92,71	C17 ciclohexano	683	826	0,019	C23H46	2077	
97,15	3,76	97,21	C17 ciclohexano	637	855	0,035	C23H46	2179	
101,20	3,72	101,26	C20 ciclopentano	653	815	0,119	C26H52	2275	
Hidrocarbonetos saturados				38 picos	19,373			1,437**	
77,65	3,55	77,71	C11 ciclopenteno	800	818	0,036	C16H30	1767	
78,40	3,69	78,46	C9 ciclohexene	791	864	0,026	C15H28	1781	
83,80	3,72	83,86	C10 ciclohexeno	749	824	0,027	C16H30	1888	
86,95	3,60	87,01	C11 ciclopenteno	714	820	0,027	C16H30	1953	
88,75	3,79	88,81	C10 ciclohexeno	825	836	0,025	C16H30	1991	
93,40	3,88	93,46	C10 ciclohexeno	747	794	0,037	C16H30	2094	
96,25	3,72	96,31	C10 ciclopenteno	776	835	0,032	C16H30	2159	
10,30	2,21	10,34	hepteno	788	848	0,092	C7H14	725	
13,45	2,76	13,50	1,3,5-heptatrieno*	869	871	0,032	C7H10	781	781
56,05	3,05	56,10	Tetradeceno	885	896	0,030	C14H28	1393	

62,20	3,10	62,25	Hexadeceno	922	922	0,130	C13H26	1493	
63,70	3,16	63,75	HC insaturado	773	896	0,009	C16H32	1518	
68,20	3,14	68,25	1-hexadeceno*	915	915	0,265	C16H32	1593	1592
68,80	3,18	68,85	HC insaturado	916	916	0,018	C16H32	1603	
69,55	3,21	69,60	1-hexadeceno*	863	915	0,019	C16H32	1617	1593
72,55	3,37	72,61	HC insaturado	760	869	0,070	C16H30	1672	
73,30	3,23	73,35	HC insaturado	868	873	0,270	C16H32	1686	
73,75	3,21	73,80	HC ins C16	938	938	0,942	C16H32	1694	
74,35	3,23	74,40	HC insaturado	912	912	0,090	C18H36	1706	
75,10	3,26	75,15	HC insaturado	916	919	0,060	C18H36	1719	
77,05	3,23	77,10	HC insaturado	811	861	0,109	C18H36	1756	
78,25	3,29	78,30	HC insaturado	921	922	0,058	C18H36	1778	
78,25	3,41	78,31	HC insaturado	755	889	0,077	C10H18	1778	
79,00	3,27	79,05	3-octadeceno*	929	929	2,627	C18H36	1792	1795
79,30	3,41	79,36	HC ins	908	912	0,059	C14H26	1797	
79,60	3,29	79,65	HC insaturado	919	919	0,244	C18H36	1803	
80,35	3,32	80,41	HC insaturado	912	912	0,107	C18H36	1818	
81,10	3,25	81,15	HC insaturado	782	816	0,160	C18H36	1833	
82,30	3,30	82,36	HC insaturado	794	820	0,099	C16H32	1858	
83,20	3,34	83,26	HC insaturado	902	906	0,185	C18H36	1876	
83,50	3,34	83,56	HC insaturado	923	923	0,542	C18H36	1882	
84,10	3,32	84,16	1-nonadeceno*	947	951	2,681	C19H38	1894	1895
85,00	3,49	85,06	HC ins	848	848	0,019	C14H26	1913	
85,30	3,37	85,36	HC insaturado	895	895	0,142	C20H40	1919	
85,75	3,31	85,81	HC insaturado	847	872	0,060	C20H40	1928	
86,20	3,32	86,26	HC insaturado	875	886	0,121	C20H40	1938	
86,95	3,34	87,01	HC insaturado	843	843	0,137	C20H40	1953	
88,00	3,51	88,06	HC insaturado	908	917	0,116	C14H26	1975	
88,90	3,38	88,96	HC ins C20	931	931	3,474	C20H40	1994	
90,10	3,43	90,16	HC insaturado	904	904	0,131	C20H40	2020	
90,40	3,38	90,46	HC insaturado	814	836	0,034	C18H36	2027	
91,15	3,38	91,21	HC insaturado	850	872	0,057	C20H40	2043	
91,60	3,40	91,66	HC insaturado	816	845	0,062	C22H44	2053	
92,50	3,46	92,56	HC insaturado	899	899	0,114	C20H40	2073	
93,40	3,44	93,46	10-heneicoseno*	936	939	3,067	C21H42	2093	2060
94,60	3,49	94,66	HC insaturado	884	886	0,183	C21H42	2121	
95,20	3,42	95,26	HC insaturado	799	870	0,094	C20H40	2135	
97,00	3,62	97,06	HC insaturado	908	915	0,142	C14H26	2176	
97,75	3,50	97,81	1-docoseno*	963	965	2,868	C22H44	2193	2195
98,65	3,67	98,71	HC insaturado	876	876	0,028	C20H38	2214	
98,95	3,55	99,01	HC insaturado	930	931	0,198	C22H44	2221	
99,85	3,49	99,91	HC insaturado	774	851	0,040	C20H40	2243	
101,50	3,57	101,56	HC insaturado	913	914	0,628	C22H44	2282	
101,95	3,56	102,01	9-tricoseno (Z)*	901	901	3,424	C23H46	2293	2298
103,15	3,61	103,21	HC insaturado	905	906	0,237	C22H44	2323	
104,35	3,58	104,41	HC insaturado	810	879	0,071	C22H44	2354	
105,40	3,63	105,46	HC insaturado	884	884	0,343	C23H46	2381	
106,00	3,63	106,06	HC ins C24	955	956	2,907	C22H44	2396	
107,05	3,69	107,11	HC insaturado	917	918	0,124	C22H44	2423	

113,05	3,76	113,11	HC insaturado	880	885	0,435	C26H52	2580	
113,65	3,75	113,71	9-hexacoseno*	909	913	3,896	C26H52	2596	2566
114,55	3,82	114,61	HC insaturado	877	878	0,256	C26H52	2611	
115,30	3,74	115,36	HC insaturado	822	874	0,067	C22H44	2622	
118,15	3,89	118,21	HC insaturado	880	881	0,509	C26H52	2663	
118,75	3,83	118,81	HC insaturado	878	879	0,283	C22H44	2672	
120,55	3,95	120,62	HC ins C28	907	915	11,538	C26H52	2698	
121,60	4,06	121,67	HC insaturado	892	895	0,947	C26H52	2712	
122,95	4,45	123,02	HC insaturado	784	843	0,098	C20H38	2729	
125,20	4,58	125,28	HC insaturado	903	911	0,046	C22H44	2759	
128,20	4,94	128,28	HC ins C30	924	925	1,561	C22H44	2798	
								18,879*	
			Hidrocarbonetos insaturados	70 picos	47,643			*	
10,30	2,42	10,34	2,5-dimetil, tetrahydro, furano*	685	887	0,031	C6H12O	725	727
10,75	2,49	10,79	C2 tetrahydro furano	829	870	0,121	C6H12O	733	
10,75	2,54	10,79	2,4-dimetil, furano*	864	878	0,130	C6H8O	733	735
15,55	2,92	15,60	2,3,5-trimetil, furano*	871	875	0,093	C7H10O	817	817
63,55	5,58	63,64	C2 fenil furano	678	769	0,022	C12H12O	1516	
43,15	4,77	43,23	C2 benzofurano	823	860	0,022	C10H10O	1203	
44,35	4,79	44,43	4,7-dimetil, benzofurano*	695	833	0,058	C10H10O	1220	1220
44,80	4,85	44,88	C2 benzofurano	545	727	1,639	C10H10O	1226	
77,05	6,84	77,16	fenil benzofurano	886	894	0,162	C14H10O	1757	
79,30	6,77	79,41	fenil benzofurano	854	881	0,040	C14H10O	1798	
80,80	6,71	80,91	C2 naftofurano	809	856	0,263	C14H12O	1828	
64,15	6,24	64,25	Dibenzofurano*	892	892	0,209	C12H8O	1526	1521
70,30	6,13	70,40	4-metil, dibenzofurano*	804	804	0,178	C13H10O	1631	1639
71,65	6,41	71,76	C1 dibenzofurano	873	876	0,101	C13H10O	1657	
76,75	6,07	76,85	C2 naftofurano	811	814	0,076	C14H12O	1751	
86,50	6,67	86,61	C1 dihidro fenil benzofurano	649	673	0,087	C15H14O	1945	
96,10	8,42	96,24	benzonaftofurano	885	885	0,044	C16H10O	2157	
97,75	8,73	97,90	benzonaftofurano	842	857	0,011	C16H10O	2195	
54,70	5,85	54,80	C1 metoxi benzofurano	697	725	0,036	C10H10O2	1373	
60,40	5,44	60,49	C2 metoxi benzofurano	630	828	0,010	C11H12O2	1464	
79,00	7,18	79,12	metoxi dibenzofurano	879	895	0,012	C13H10O2	1793	
53,35	5,81	53,45	benzodifurano	637	822	0,005	C10H6O2	1352	
68,50	5,26	68,59	C1 alil dimetoxi benzeno	751	802	0,039	C12H16O2	1598	
82,60	5,99	82,70	etenil fenil metoxi benzeno	706	753	0,095	C15H14O	1865	
84,25	6,40	84,36	etenil fenil metoxi benzeno	705	731	0,139	C15H14O	1898	
86,80	6,79	86,91	etenil fenil metoxi benzeno	662	728	0,060	C15H14O	1951	
71,05	6,15	71,15	xanteno	907	911	0,228	C13H10O	1645	
71,95	6,59	72,06	9H-xanteno*	842	842	0,177	C13H10O	1662	1661
82,30	6,12	82,40	C2 xanteno	814	854	0,051	C15H14O	1859	
95,35	8,11	95,49	benzoxanteno	892	901	0,037	C16H10O	2140	
96,85	8,36	96,99	benzoxanteno	714	840	0,019	C16H10O	2174	
28,45	4,76	28,53	benzodioxole	628	882	0,006	C7H6O2	1002	
60,10	6,20	60,20	metoxi naftaleno	890	890	0,127	C11H10O	1459	
61,00	5,71	61,10	dimetoxi indeno	710	729	0,082	C11H12O2	1474	
72,40	6,56	72,51	6H-dibenzopirano*	807	815	0,105	C13H10O	1671	1678
75,85	6,53	75,96	C1 acetil nafto dioxole	881	900	0,047	C14H12O3	1734	

80,35	6,69	80,46	dihidrodibenzo oxepino	690	781	0,279	C14H12O	1819	
83,35	6,81	83,46	fenil cromeno	763	765	0,133	C15H12O	1880	
85,30	6,29	85,40	C1 di metoxi fluoreno	617	673	0,013	C16H16O2	1920	
101,35	8,27	101,49	fenantropirano	638	872	0,045	C17H12O	2280	
			Éteres	40 picos	5,035			0,982**	
64,15	5,92	64,25	o-hidroxi bifenila*	751	768	0,052	C12H10O	1526	1507
78,40	6,43	78,51	etenil, fenil, fenol	724	752	0,433	C14H12O	1782	
79,30	6,57	79,41	etenil, fenil, fenol	769	792	0,086	C14H12O	1798	
79,60	6,64	79,71	etenil, fenil, fenol	722	750	0,044	C14H12O	1804	
79,90	6,66	80,01	etenil, fenil, fenol	771	795	0,075	C14H12O	1810	
			Fenóis	5 picos	0,690			0,052**	
68,05	3,43	68,11	C5 oxalato de isobutila	680	874	0,091	C11H20O4	1590	
68,35	6,11	68,45	benzenodicarboxilato de dietila 1,2-benzenocarboxilato di(2-	934	936	0,356	C12H14O4	1596	
82,90	5,55	82,99	metil propil)*	902	903	0,242	C16H22O4	1870	1872
83,35	4,28	83,42	benzenoacetato de 2-fenil etil*	795	864	0,014	C11H14	1879	1898
85,60	3,85	85,66	C1 pentadecanoato de metila	838	838	0,032	C17H34O2	1925	
94,90	3,95	94,97	octanoato de metila*	800	802	0,016	C19H38O2	2128	2128
			Ésteres	6 picos	0,751			0,272**	
87,25	4,05	87,32	n-hexadecanóico*	744	833	0,030	C16H32O2	1960	1958
			Ácidos carboxílicos	1 picos	0,030			0,000**	
10,15	2,60	10,19	Pentanal*	718	802	0,026	C5H10O	722	702
36,10	3,66	36,16	Nonanal*	662	800	0,016	C9H18O	1104	1106
63,40	3,79	63,46	Tridecana*I	820	885	0,023	C13H26O	1513	1512
69,25	3,88	69,31	Tetradecanal*	728	867	0,035	C14H28O	1611	1614
74,95	3,85	75,01	Pentadecanal*	907	926	0,028	C15H30O	1717	1717
80,20	3,90	80,27	Hexadecanal	886	893	0,032	C16H32O	1815	
85,30	3,94	85,37	aldeído saturado	878	882	0,049	C18H36O	1919	
90,10	3,99	90,17	Octadecanal*	865	866	0,042	C18H36O	2020	2021
94,75	4,03	94,82	aldeído saturado	894	894	0,051	C16H32O	2124	
99,10	4,09	99,17	aldeído saturado	839	842	0,051	C19H38O	2225	
103,30	4,15	103,37	aldeído saturado	866	871	0,047	C18H36O	2327	
107,35	4,21	107,42	aldeído saturado	859	859	0,059	C18H36O	2431	
111,25	4,27	111,32	aldeído saturado	872	872	0,059	C18H36O	2532	
115,00	4,33	115,07	aldeído saturado	877	878	0,052	C18H36O	2618	
118,60	4,41	118,67	aldeído saturado	870	874	0,064	C18H36O	2670	
122,05	4,65	122,13	aldeído saturado	879	880	0,069	C18H36O	2718	
51,85	3,78	51,91	C1 ciclohexenenil butenal	610	704	0,172	C11H16O	1328	
103,60	4,61	103,68	octadecadienal	675	820	0,028	C18H32O	2335	
25,45	4,94	25,53	Benzaldeído*	946	946	0,303	C7H6O	963	968
85,30	6,72	85,41	etenil fenil banzaldeído	636	735	0,023	C15H12O	1920	
59,65	5,89	59,75	hidroxi naftaldeído	860	865	0,110	C11H8O2	1452	
60,40	5,89	60,50	hidroxi naftaldeído	848	858	0,283	C11H8O2	1464	
61,45	6,02	61,55	hidroxi naftaldeído	826	842	0,149	C11H8O2	1481	
66,85	5,91	66,95	metoxi naftalenocarboxaldeído	732	732	0,163	C12H10O2	1571	
72,25	6,44	72,36	bifenil carboxaldeído	838	850	0,196	C13H10O	1668	
73,30	6,67	73,41	bifenil carboxaldeído	754	846	0,006	C13H10O	1687	
73,75	6,70	73,86	bifenil carboxaldeído	871	871	0,197	C13H10O	1696	
88,15	7,77	88,28	antracenocarboxaldeído	857	859	0,178	C15H10O	1980	

88,75	7,88	88,88	antracencarboxaldeído	875	876	0,262	C15H10O	1992	
93,85	7,75	93,98	C1 antraceno carboxaldeído	749	756	0,325	C16H12O	2105	
74,80	6,90	74,92	naftil acrilaldeído	858	869	0,220	C13H10O	1715	
75,25	7,03	75,37	naftil acrilaldeído	820	822	0,059	C13H10O	1723	
			Aldeídos	32 picos	3,377			0,473**	
54,25	5,70	54,35	hidroxi benzilideno	774	782	0,046	C10H10O2	1366	
56,95	4,78	57,03	C3 trimetil dihidro indenona	703	825	0,022	C12H14O	1408	
58,30	4,82	58,38	C3 trimetil dihidro indenona	786	824	0,046	C12H14O	1430	
82,60	6,73	82,71	fenil indanona	827	833	0,039	C15H12O	1865	
59,95	5,59	60,04	C4 acetofenona	794	804	0,137	C12H16O	1457	
62,80	6,40	62,91	acetonaftona	625	841	0,011	C12H10O	1503	
82,90	6,12	83,00	benzil acetofenona	688	810	0,037	C15H14O	1871	
84,10	6,44	84,21	benzil acetofenona	701	826	0,064	C15H14O	1895	
60,40	5,78	60,50	C3 isobenzofuranona	746	798	0,020	C11H12O2	1464	
66,25	5,60	66,34	C4 benzofuranona	843	855	0,090	C12H14O2	1561	
70,60	6,88	70,71	Benzofenona*	931	943	0,320	C13H10O	1637	1621
65,35	6,55	65,46	acenaftilenona	889	889	0,085	C12H8O	1546	
65,80	6,71	65,91	acenaftilenona	899	899	0,383	C12H8O	1554	
67,30	6,81	67,41	acenaftilenona	898	898	0,324	C12H8O	1579	
52,15	4,88	52,23	fenil pentenona	647	791	0,029	C11H12O	1333	
62,20	5,32	62,29	C1 fenil ciclopentenona	728	786	0,044	C12H12O	1493	
64,90	5,78	65,00	C1 hidroxi fenil ciclopentenona	649	713	0,048	C12H12O2	1538	
66,25	5,88	66,35	metileno fenil ciclohexanona	706	758	0,045	C13H14O	1561	
67,45	5,95	67,55	C1 hidroxi fenil ciclopentenona	713	759	0,154	C12H12O2	1581	
82,90	3,44	82,96	C2 acetil, etenil, ciclopentano	649	753	0,020	C11H18O	1870	
76,45	6,03	76,55	bifenil etanona	785	810	0,201	C14H12O	1745	
77,35	6,33	77,46	bifenil etanona	617	726	0,044	C14H12O	1762	
81,85	5,98	81,95	benzil fenil etanona	745	802	0,055	C15H14O	1849	
67,60	5,93	67,70	C2 furobenzopiranona	716	743	0,355	C13H10O3	1583	
70,30	6,05	70,40	C3 coumarin	666	689	0,177	C12H12O2	1631	
74,35	6,75	74,46	dihidro oxo fenaleno	809	809	0,310	C13H10O	1707	
85,75	7,60	85,88	antracenodiona	681	766	0,009	C14H8O2	1930	
90,85	4,86	90,93	dihidro cromenil acetato	630	768	0,035	C11H12O3	2037	
92,05	7,67	92,18	fenil benzopiranona	613	752	0,040	C15H10O2	2065	
			Cetonas	29 picos	3,190			0,320**	
42,55	5,78	42,65	nitrogenado	602	672	0,877	C5H4N2O3	1194	
73,15	5,83	73,25	nitrogenado	700	713	0,132	C13H16N2	1684	
77,50	6,11	77,60	diamina fluoreno	682	684	0,079	C13H12N2	1765	
81,10	7,80	81,23	C1 carbazol	649	843	0,009	C13H11N	1835	
85,15	6,58	85,26	C2 carbazol amina	703	710	0,059	C14H14N2	1917	
87,85	4,14	87,92	etil amina	710	725	0,065	C9H13N	1972	
88,90	4,88	88,98	C1 indazol	744	898	0,006	C8H8N2	1994	
			Compostos nitrogenados	7 picos	1,227			0**	
30,40	3,39	30,46	2-etil, 1-hexanol*	787	871	0,007	C8H18O	1028	1030
75,85	3,11	75,90	pentadecanol	833	838	0,115	C15H32O	1733	
76,45	3,14	76,50	pentadecanol	813	816	0,137	C15H32O	1744	
82,60	3,48	82,66	Hexadecanol*	832	861	0,026	C16H34O	1864	1871
104,05	4,64	104,13	nonadecanol	819	883	0,022	C19H38O	2347	
89,80	3,54	89,86	tetradecanodiol	895	898	0,038	C14H30O2	2013	

91,00	4,47	91,07	(9Z)-9-octadec-1-nol*	737	882	0,013	C18H36O	2040	2069
62,05	6,03	62,15	metoxi naftalenol	738	791	0,021	C11H10O2	1491	
66,70	5,80	66,80	bifenildioli	740	769	0,066	C12H10O2	1568	
68,35	6,06	68,45	bifenildioli	723	724	0,394	C12H10O2	1596	
66,70	6,15	66,80	C1 naftalenometanol	794	810	0,119	C12H12O	1568	
67,90	6,32	68,01	C1 naftalenometanol	749	802	0,024	C12H12O	1588	
77,65	4,03	77,72	C1 fenil hexenol	723	741	0,036	C13H18O	1767	
78,10	4,23	78,17	fenil octanol	805	853	0,009	C14H22O	1775	
88,45	4,33	88,52	fenil decanol	653	868	0,018	C16H26O	1985	
89,95	5,40	90,04	naftaleno metanol	760	783	0,034	C12H12O	2017	
72,70	6,66	72,81	fluorenol	861	861	0,633	C13H10O	1676	
85,45	6,63	85,56	C2 fluorenol	721	768	0,069	C15H14O	1923	
Álcoois				18 picos	1,783			0,047**	
Totais				379 picos	100,0			32,829	

(¹⁺²t_R)^a: soma do tempo de retenção nas duas dimensões em minutos (soma do tempo da ¹D com o tempo da ²D); S^b: similaridade da biblioteca; R^c: similaridade modo reversa da biblioteca; A^d: área percentual calculada; LTPRI^e: índice retenção; IR_{calc.}=índice de retenção calculado para cada composto, IR_{lit.}= índice de retenção teórico referente à literatura (NIST).

* Identificação confirmada pelo LTPRI. A identificação dos demais compostos foi somente por comparação com os espectros da biblioteca do GCxGC/TOFMS (biblioteca Nist) e análise detalhada de cada espectro, não especificando as posições das ramificações e insaturações.;

**Soma das áreas percentuais dos compostos positivamente pelo LTPRI

Tabela 3: Identificação dos compostos da fração BOF3 do bio-óleo bruto não catalítico do bagaço da cana-de-açúcar (BO BC) por GCxGC/TOF MS.

¹ t _R (min)	² t _R (s)	¹⁺² t _R (min) ^a	Nome	S ^b	R ^c	A (%) ^d	Fórmula	LTPRI ^e	
								IR _{Cal}	IR _{Lit}
13,15	2,92	13,20	Tolueno*	945	945	46,953	C7H8	776	769
18,55	3,33	18,61	etil, benzeno*	881	881	0,251	C8H10	865	865
19,00	3,33	19,06	o-xileno*	910	910	0,243	C8H10	872	863
20,65	3,52	20,71	p-xileno*	772	903	0,038	C8H10	898	884
39,55	4,75	39,63	1-metil,1H-indeno*	536	812	0,027	C10H10	1192	1172
Hidrocarbonetos aromáticos				5 picos		47,512		47,472**	
11,80	2,30	11,84	C3 ciclopentano*	514	784	0,035	C8H16	752	777
10,15	2,12	10,19	Heptano	756	917	0,095	C7H16	722	
12,85	2,27	12,89	2-metil, heptano*	547	851	0,023	C8H18	770	765
14,65	2,35	14,69	octano	607	883	0,097	C8H18	802	
74,05	3,09	74,10	hexadecano	651	905	0,024	C16H34	1700	
79,45	3,13	79,50	heptadecano	730	869	0,066	C17H36	1800	
84,40	3,20	84,45	HC saturado	878	878	0,046	C20H42	1900	
89,20	3,25	89,25	2,6,10,15-tetrametil, heptadecano*	872	872	0,115	C21H44	1894	1914
93,70	3,31	93,76	HC saturado	867	867	0,083	C21H44	2100	
98,05	3,37	98,11	HC saturado	869	869	0,154	C20H42	2095	
110,05	3,57	110,11	HC saturado	921	921	0,145	C27H56	2500	
117,25	3,72	117,31	HC saturado	916	916	0,655	C27H56	2650	
124,30	4,22	124,37	HC saturado	921	921	0,220	C27H56	2747	
128,35	4,78	128,43	HC saturado	691	808	0,020	C27H56	2800	
Hidrocarbonetos saturados				14 picos		1,780		0,173**	
12,70	2,65	12,74	1,3,5-heptatrieno*	682	879	0,018	C7H10	768	781
79,00	3,25	79,05	octadeceno	829	888	0,072	C18H36	1792	
84,10	3,30	84,16	9-monadeceno*	849	873	0,112	C19H38	1894	1893

88,75	3,37	88,81	HC insaturado	615	871	0,051	C19H38	1895	
88,90	3,44	88,96	1-nonadeceno*	881	898	0,107	C19H38	1895	1895
93,40	3,42	93,46	HC insaturado	883	887	0,183	C21H42	2100	
97,75	3,48	97,81	HC insaturado	897	903	0,166	C20H40	2096	
101,95	3,54	102,01	HC insaturado	917	924	0,185	C22H44	2300	
102,40	3,57	102,46	HC insaturado	577	811	0,014	C22H44	2304	
106,00	3,61	106,06	HC insaturado	928	934	0,271	C22H44	2396	
109,90	3,66	109,96	HC insaturado	831	878	0,112	C23H46	2496	
113,50	3,74	113,56	HC insaturado	796	907	0,296	C22H44	2592	
120,55	3,90	120,62	HC insaturado	867	870	0,627	C26H52	2698	
11,95	2,57	11,99	C1 ciclohexadieno	918	946	0,231	C7H10	754	
12,25	2,62	12,29	C1 ciclohexadieno	913	946	0,112	C7H10	760	
17,35	2,64	17,39	cicloheptatrieno	675	905	0,015	C7H8	845	
Hidrocarbonetos insaturados				16 picos		2,571		0,236**	
43,15	4,77	43,23	C2 benzofurano	724	823	0,070	C10H10O	1200	
43,75	4,78	43,83	4,7-dimetil, benzofurano*	648	784	0,015	C10H10O	1198	1220,4
66,70	2,49	66,74	trioxepano	534	865	0,013	C4H8O3	1567	
83,95	6,88	84,06	bifenil dimetoxi	566	709	0,033	C14H14O2	1892	
Éteres				4 picos		0,130		0,015**	
74,05	7,11	74,17	C2 naftol	790	790	0,320	C12H12O	1701	
79,60	6,94	79,72	C3 naftol	737	836	0,077	C13H14O	1804	
80,80	7,17	80,92	C3 naftol	732	766	0,018	C13H14O	1829	
Fenóis				3 picos		0,415		0,000**	
75,40	3,76	75,46	tetradecanoato de metila*	882	882	0,106	C15H30O2	1725	1726
79,00	3,74	79,06	tetradecanoato de etila*	583	790	0,008	C16H32O2	1792	1796
80,65	3,61	80,71	tetradecanoato de isoprolila*	609	735	0,038	C17H34O2	1824	1831
80,65	3,80	80,71	pentadecanoato de metila*	852	852	0,076	C16H32O2	1824	1820
83,80	3,79	83,86	14-metil, pentanoato de metila*	836	880	0,036	C17H34O2	1888	1884
85,60	3,86	85,66	hexadecanoato de metila*	903	903	4,193	C17H34O2	1899	1910
88,60	3,84	88,66	14-metil, pentanoato de metila*	683	779	0,035	C17H34O2	1895	1888
89,05	3,87	89,11	C1 pentadecanoato de metila	792	816	0,033	C17H34O2	1894	
90,25	3,71	90,31	hexadecanoato de propila*	728	728	0,093	C19H38O2	2096	2091
90,40	3,89	90,46	éster saturado	848	848	0,134	C18H36O2	2096	
92,65	3,95	92,72	éster saturado	761	761	0,409	C21H40O2	2099	
94,90	3,94	94,97	octadecanoato de metila*	865	865	2,912	C19H38O2	2099	2110
114,85	4,26	114,92	éster saturado	834	834	0,125	C18H36O2	2615	
84,70	4,05	84,77	hexadecenoato de metila*	561	756	0,031	C17H32O2	1900	1912
85,30	4,01	85,37	7-hexadecenoato de metila*	709	728	0,055	C17H32O2	1899	1899,6
93,55	4,32	93,62	éster insaturado	820	874	0,281	C19H34O2	2100	
93,85	4,14	93,92	11-octadecenoato de metila*	817	817	0,560	C19H36O2	2100	2115
100,30	4,24	100,37	éster insaturado	662	709	0,199	C23H44O2	2298	
118,30	4,46	118,37	éster insaturado	686	752	0,077	C23H44O2	2665	
72,10	3,36	72,16	alil oxalato de octila	574	879	0,013	C13H22O4	1664	
87,40	4,08	87,47	C8 oxalato de nonila	652	796	0,044	C19H36O4	1896	
121,60	4,04	121,67	ciclobutil oxalato de octadecila	726	864	0,036	C24H44O4	2712	
74,95	4,62	75,03	2-etil, benzoato de hexil*	750	782	0,035	C15H22O2	1717	1735
82,90	5,54	82,99	1,2-benzenocarboxilato di(2-metil propil)*	899	900	0,688	C16H22O4	1870	1872
98,20	4,93	98,28	benzoato de octila	670	803	0,010	C15H22O2	2296	

102,55	4,96	102,63	benzoato de undecila	790	798	0,057	C18H28O2	2308	
112,00	5,47	112,09	benzenodicarboxilato de diisocetil	892	894	1,592	C24H38O4	2553	
			Ésteres	27 picos	11,877			8,858**	
82,45	7,03	82,57	bifenil ácido carboxílico	685	729	0,146	C13H10O2	1862	
			Ácido carboxílicos	1 pico	0,146			0,000**	
74,95	3,85	75,01	Pentadecanal*	924	932	0,215	C15H30O	1717	1717
80,20	3,90	80,27	Hexadecanal*	886	886	0,364	C16H32O	1815	1831
85,30	3,94	85,37	aldeído saturado	913	914	0,481	C16H32O	1899	
103,30	4,14	103,37	aldeído saturado	901	901	1,499	C16H32O	2327	
107,35	4,20	107,42	aldeído saturado	880	882	1,475	C18H36O	2431	
111,25	4,28	111,32	aldeído saturado	892	894	3,408	C18H36O	2532	
115,00	4,34	115,07	aldeído saturado	879	881	1,422	C18H36O	2618	
118,60	4,41	118,67	aldeído saturado	873	875	1,052	C18H36O	2670	
122,05	4,65	122,13	aldeído saturado	880	881	1,572	C18H36O	2718	
125,50	3,07	125,55	aldeído saturado	758	824	0,198	C18H36O	2762	
125,95	5,33	126,04	aldeído saturado	882	883	0,937	C18H36O	2769	
130,45	6,26	130,55	aldeído saturado	883	884	15,956	C18H36O		
74,50	4,04	74,57	hexadecadienal	549	676	0,015	C16H28O	1709	
79,90	4,06	79,97	11-hexadecenal-cis*	758	868	0,083	C16H30O	1809	1809
85,00	4,09	85,07	aldeído insaturado	891	899	0,192	C18H34O	1899	
89,35	4,15	89,42	aldeído insaturado	563	830	0,004	C18H34O	2095	
89,80	4,14	89,87	aldeído insaturado	869	884	0,173	C18H34O	2096	
94,45	4,19	94,52	aldeído insaturado	911	912	0,174	C18H34O	2099	
129,40	6,25	129,50	aldeído insaturado	658	839	0,115	C18H34O		
35,80	4,70	35,88	fenil propenal	528	827	0,034	C9H8O	1183	
36,10	4,71	36,18	fenil propenal	652	886	0,032	C9H8O	1184	
			Aldeídos	21 picos	29,401			0,662**	
83,20	3,80	83,26	octadecanona	784	835	0,097	C18H36O	1876	
85,15	3,65	85,21	nonadecanona	560	724	0,001	C18H36O	1899	
78,10	3,76	78,16	heptadecanona	512	734	0,017	C17H34O	1775	
82,75	3,97	82,82	C1 ciclopentadecanona	662	833	0,240	C16H30O	1867	
87,25	7,26	87,37	C2 fluorenona	598	745	0,060	C15H12O	1897	
87,55	7,22	87,67	C2 fluorenona	509	786	0,015	C15H12O	1896	
88,45	7,57	88,58	C2 fluorenona	600	787	0,044	C15H12O	1895	
70,75	6,83	70,86	Benzofenona*	795	874	0,107	C13H10O	1640	1621
81,10	7,38	81,22	antracenona	783	783	0,136	C14H10O	1835	
81,70	7,70	81,83	naftalenil butanona	542	688	0,021	C14H14O	1847	
87,85	7,97	87,98	C2 acenaftilenona	664	771	0,074	C14H12O	1896	
			Cetonas	11 picos	0,812			0,107**	
84,40	4,33	84,47	nitrogenado	853	853	0,317	C16H31N	1900	
94,00	4,40	94,07	nitrogenado	780	799	0,102	C19H37N	2100	
42,55	5,78	42,65	nitrogenado	631	703	3,982	C5H4N2O3	1199	
			Compostos nitrogenados	3 picos	4,401			0**	
118,15	4,75	118,23	álcool saturado	716	735	0,115	C24H50O	2663	
74,65	4,01	74,72	pentadecenol	599	798	0,019	C15H30O	1711	
82,45	3,98	82,52	octadecadecenol	539	679	0,050	C18H36O	1861	
90,10	3,98	90,17	nonadecenol	889	889	0,253	C19H38O	2096	
99,10	4,08	99,17	nonadecenol	874	876	0,426	C19H38O	2297	
76,15	6,85	76,26	acetil naftalenol	614	690	0,005	C12H10O2	1740	

78,25	6,97	78,37	naftil propanol	599	688	0,003	C13H14O	1779
85,90	4,91	85,98	fenil nonanol	689	860	0,018	C15H24O	1898
95,50	5,00	95,58	ciclohexil, fenil, metanol	746	803	0,067	C13H18O	2098
Álcoois				9 picos	0,955			0**
Totais				114 picos	100,000			57,520

(¹⁺²t_R)^a: soma do tempo de retenção nas duas dimensões em minutos (soma do tempo da ¹D com o tempo da ²D); S^b: similaridade da biblioteca; R^c: similaridade modo reversa da biblioteca; A^d: área percentual calculada; LTPRI^e: índice de retenção: IR_{calc.}=índice de retenção calculado para cada composto, IR_{lit.}= índice de retenção teórico referente à literatura (NIST).

* Identificação confirmada pelo LTPRI. A identificação dos demais compostos foi somente por comparação com os espectros da biblioteca do GCxGC/TOFMS (biblioteca Nist) e análise detalhada de cada espectro, não especificando as posições das ramificações e insaturações.;

**Soma das áreas percentuais dos compostos positivamente pelo LTPRI

Tabela 4: Identificação dos compostos da fração BOF4+F5 do bio-óleo bruto não catalítico do bagaço da cana-de-açúcar (BO BC) por GCxGC/TOF MS.

¹ t _R (min)	² t _R (s)	¹⁺² t _R (min) ^a	Nome	S ^b	R ^c	A (%) ^d	Fórmula	LTPRI ^e	
								IR _{cal.}	IR _{Lit}
8,70	2,48	8,74	Benzeno*	953	955	0,055	C6H6	697	663
12,75	2,95	12,80	Tolueno*	945	945	2,644	C7H8	769	769
18,30	3,33	18,36	etil benzeno*	932	936	0,038	C8H10	861	865
18,90	3,33	18,96	o-xileno*	835	835	0,018	C8H10	870	863
31,65	4,69	31,73	1-propinil benzeno*	889	928	0,037	C9H8	1045	1058
39,45	4,78	39,53	dihidro naftaleno	887	896	0,111	C10H10	1151	
40,05	4,86	40,13	1-metil, 1H-indeno*	869	875	0,059	C10H10	1159	1172
47,10	4,75	47,18	C2 indeno	724	824	0,484	C11H12	1259	
Hidrocarbonetos aromáticos				6 picos		3,446		2,850**	
7,80	2,15	7,84	C1 ciclopentano	874	879	8,500	C6H12	683	
8,70	2,22	8,74	ciclohexano	934	934	2,989	C6H12	697	
24,15	4,35	24,22	octahidro pentaleno	766	773	0,034	C8H14	945	
7,80	2,04	7,83	2-metil hexano*	810	814	4,795	C7H16	683	664
8,55	2,06	8,58	HC sat	672	680	0,520	C7H16	694	
8,70	2,09	8,73	HC sat	767	777	0,436	C7H16	697	
Hidrocarbonetos saturados				6 picos		17,274		4,795**	
7,65	2,05	7,68	HC ins	754	839	1,685	C6H12	681	
7,95	2,17	7,99	HC ins	869	869	0,185	C6H10	685	
8,25	2,07	8,28	HC ins	868	876	3,115	C7H14	690	
8,25	2,11	8,29	HC ins	727	836	0,307	C7H12	690	
8,70	2,18	8,74	HC ins	671	695	3,103	C8H14	697	
12,00	2,61	12,04	1,3,5-heptatrieno*	920	920	0,287	C7H10	755	781
8,10	2,24	8,14	C1 ciclopentadieno	938	940	0,212	C6H8	687	
8,40	2,21	8,44	C1 ciclopenteno	945	945	1,829	C6H10	692	
9,30	2,34	9,34	ciclohexeno	942	951	0,282	C6H10	707	
9,90	2,42	9,94	C2 ciclopentadieno	764	855	0,094	C7H10	718	
11,55	2,56	11,59	C1 ciclohexadieno	905	930	0,429	C7H10	747	
12,30	2,66	12,34	C1 ciclohexadieno	904	949	0,153	C7H10	761	
Hidrocarbonetos insaturados				12 picos		11,679		0,287**	
10,05	2,78	10,10	etil 1-propenil éter*	763	803	0,007	C5H10O	720	706
16,80	2,95	16,85	metoxi hexano	618	821	0,007	C7H16O	837	
25,35	4,36	25,42	dimetoxi octano	637	731	0,022	C10H22O2	961	
32,70	5,83	32,80	butoxi etoxi butano	659	720	0,019	C10H22O2	1059	

33,60	5,31	33,69	C3 vinil pentil eter	718	776	0,029	C10H20O	1071	
45,30	4,68	45,38	C2 dimetoxi benzeno	518	739	0,152	C10H14O2	1233	
8,55	2,65	8,59	dihidro furano	934	958	0,035	C4H6O	694	
10,20	2,54	10,24	2,5-dimetil furano*	913	918	0,117	C6H8O	723	718
14,55	2,90	14,60	2-etil, 5-metil, furano*	818	861	0,011	C7H10O	801	802
30,90	5,05	30,98	2-acetil, 5-metil, furano*	873	873	0,044	C7H8O2	1035	1042
43,50	5,19	43,59	fenoxi eteno	775	780	0,141	C8H8O	1208	
45,90	5,74	46,00	bifurano	845	853	0,022	C8H6O2	1242	
44,10	5,27	44,19	2,3-dihidro, benzofurano*	863	866	1,439	C8H8O	1216	1224
49,20	5,30	49,29	2-metil, 2,3-dihidro, benzofurano*	685	729	0,162	C9H10O	1289	1306
50,55	5,33	50,64	2,3-dihidro, 2-metil, benzofurano*	810	810	0,324	C9H10O	1308	1306
57,75	6,09	57,85	C1 hidroxi benzofurano	852	878	0,057	C9H8O2	1421	
10,35	2,90	10,40	dioxano	770	884	0,004	C4H8O2	726	
26,55	4,02	26,62	C2 ciclohexil dioxalano	678	741	0,021	C11H20O2	977	
31,35	5,47	31,44	bi-dioxolano	853	894	0,036	C6H10O4	1041	
48,60	6,08	48,70	Éter glicidil furfúril	638	678	0,372	C8H10O3	1280	
			Éteres	20 picos	3,022			2,103	**
26,70	4,47	26,77	Fenol*	962	962	5,241	C6H6O	979	981
32,10	4,68	32,18	2-metil, fenol*	945	945	1,719	C7H8O	1051	1052
33,75	4,69	33,83	4-metil, fenol*	950	950	4,541	C7H8O	1073	1077
36,15	4,87	36,23	2,6-dimetil fenol*	851	851	0,067	C8H10O	1105	1104
38,40	4,71	38,48	2-etil, fenol*	904	904	0,175	C8H10O	1137	1137
39,15	4,79	39,23	2,4-dimetil, fenol*	952	952	1,007	C8H10O	1147	1150
40,50	4,90	40,58	4-etil, fenol*	898	912	7,799	C8H10O	1166	1163
41,40	4,99	41,48	2,3-dimetil, fenol	865	865	0,088	C8H10O	1178	1181
42,45	5,02	42,53	3,4-dimetil, fenol*	914	917	0,179	C8H10O	1193	1195
43,35	4,88	43,43	C3 fenol	875	875	0,075	C9H12O	1205	
44,40	4,72	44,48	2-propil, fenol*	786	798	0,025	C9H12O	1220	1221
44,85	4,77	44,93	3-isopropil, fenol*	866	913	0,989	C9H12O	1227	1228
45,60	4,86	45,68	2-etil, 6-metil, fenol*	915	919	0,988	C9H12O	1237	1236
46,65	5,09	46,73	p-alil, fenol*	884	900	0,461	C9H10O	1252	1254
46,95	4,83	47,03	4-propil, fenol*	941	941	0,528	C9H12O	1256	1260
47,10	4,87	47,18	4-etil, 3-metil, fenol*	865	886	0,022	C9H12O	1259	1239
47,25	5,05	47,33	C3 fenol	739	802	0,018	C9H12O	1261	
47,70	5,00	47,78	2,3,6-trimetil, fenol*	867	872	0,046	C9H12O	1267	1246
48,30	5,08	48,38	C3 fenol	804	841	0,070	C9H12O	1276	
49,50	4,92	49,58	6-isopropil, m-cresol*	816	825	0,043	C10H14O	1293	1291
50,10	5,28	50,19	3,4,5-trimetil, fenol*	741	792	0,039	C9H12O	1301	1320
50,55	4,71	50,63	2-metil, 6-propil, fenol*	610	818	0,013	C10H14O	1308	1320
50,70	4,81	50,78	C4 fenol	812	834	0,200	C10H14O	1311	
51,45	5,12	51,54	C1 propenil fenol	820	823	0,077	C10H12O	1322	
51,75	4,83	51,83	2-metil, 6-propil, fenol*	871	892	0,074	C10H14O	1327	1320
52,35	5,40	52,44	propenil fenol	839	858	0,210	C9H10O	1336	
53,70	4,88	53,78	4-butil, fenol*	848	848	0,014	C10H14O	1357	1361
54,60	5,22	54,69	C1 propenil fenol	809	855	0,042	C10H12O	1371	
55,20	5,30	55,29	C1 alil fenol	800	812	0,020	C10H12O	1380	
56,10	5,26	56,19	C1 propenil fenol	753	810	0,068	C10H12O	1394	
57,60	5,39	57,69	C1 propenil fenol	797	832	0,047	C10H12O	1419	

58,35	6,40	58,46	C4 fenol	739	756	0,022	C10H14O	1431	
79,20	7,14	79,32	C1 fenil fenol	698	862	0,010	C13H12O	1797	
80,40	7,18	80,52	C1 fenil, fenol	787	811	0,032	C13H12O	1821	
42,75	5,29	42,84	1,2-benzenodiol*	948	948	5,541	C6H6O2	1197	1199
47,10	5,43	47,19	3-metil, 1,2-benzenodiol*	918	918	0,440	C7H8O2	1259	1263
48,00	6,20	48,10	benzenodiol	889	889	1,646	C6H6O2	1272	
49,65	5,27	49,74	4-metil, 1,2-benzenodiol*	785	888	0,059	C7H8O2	1295	1294
55,35	5,50	55,44	4-etil, catecol*	922	928	0,766	C8H10O2	1383	1392
52,65	6,32	52,76	C1 benzenodiol	915	917	0,076	C7H8O2	1341	
56,85	5,72	56,95	C2 benzenodiol	707	779	0,033	C8H10O2	1406	
58,35	5,60	58,44	C2 benzenodiol	738	812	0,015	C8H10O2	1431	
61,20	5,46	61,29	C2 benzenodiol	791	791	0,059	C9H12O2	1477	
52,65	5,76	52,75	2,3-dihidro, 1H-inden-5-ol*	920	921	0,194	C9H10O	1341	1335
53,55	6,20	53,65	indenol	894	897	0,314	C9H8O	1355	
55,80	5,52	55,89	C1 indanol	791	849	0,079	C10H12O	1390	
57,75	5,71	57,85	C1 indanol	825	889	0,056	C10H12O	1421	
58,65	5,87	58,75	C1 indanol	659	789	0,013	C10H12O	1436	
45,15	5,62	45,24	isoproxi fenol	866	866	0,149	C9H12O2	1231	
69,75	7,21	69,87	C1 naftalenol	880	884	0,096	C11H10O	1622	
85,95	8,37	86,09	2-hidroxi, fluoreno*	883	890	0,019	C13H10O	1934	1941
								31,080*	
			Fenóis	51 picos	34,508			*	
7,65	2,27	7,69	metanoato de propenila	810	961	0,015	C4H6O2	681	
11,10	2,97	11,15	n-etanoato de propila*	717	728	0,015	C5H10O2	739	728
13,05	2,76	13,10	C1 acetato de propila	909	911	0,014	C6H12O2	774	
18,75	3,98	18,82	propanoato de alil	845	871	0,019	C6H10O2	868	
20,55	4,33	20,62	propanoato de propila	680	795	0,010	C6H12O2	897	
34,50	4,90	34,58	etileno dipropionato	731	896	0,037	C8H18N2	1083	
79,05	3,72	79,11	tetradecanoato de metila*	780	835	0,008	C16H32O2	1793	1796
85,65	3,84	85,71	C1 pentadecanoato de metila	841	841	0,020	C17H34O2	1926	
93,75	4,15	93,82	docosenoato de metila	799	826	0,027	C23H44O2	2101	
35,85	5,78	35,95	hidroxi butanoato de metila	681	864	0,446	C5H10O	1101	
48,15	5,97	48,25	hidroxi heptanoato de metila	611	625	0,021	C8H16O3	1274	
18,30	4,40	18,37	acético anidrido	852	962	0,195	C4H6O3	861	
18,30	4,22	18,37	ácido propanóico anidrido	834	964	0,082	C6H10O3	861	
48,60	6,87	48,71	ciclopentano acetato de etenila	690	724	0,092	C9H14O2	1280	
51,00	7,24	51,12	ciclohexanocarboxilato de etenila	709	724	0,108	C9H14O2	1316	
40,80	4,95	40,88	4-metil, fenil, acetato*	838	838	0,018	C9H10O2	1170	1166
			C1 oxotetrahydro						
52,50	7,53	52,63	furancarboxaldeído	821	890	0,005	C6H8O4	1339	
56,55	5,03	56,63	metoxi benzenoacetato de etila	771	932	0,016	C10H12O3	1401	
59,25	5,41	59,34	ciclopentil benzoato de metila	674	729	0,023	C13H16O2	1445	
67,50	6,52	67,61	4-hidroxi, benzenopropanoato de metila*	743	780	0,009	C10H12O3	1582	1592
			fenil, hidroxi, propanoato de metila						
76,65	7,19	76,77	bi (2-metil, propil),	668	717	0,044	C10H10O3	1749	
82,95	5,53	83,04	benzenodicarboxaldeído éster*	899	900	0,100	C16H22O4	1871	1872
29,85	4,00	29,92	propioniloxi propionato de propila	911	963	0,002	C9H16O4	1021	
31,20	6,08	31,30	oxo pentanoato de metila	775	846	0,027	C9H18O	1039	
37,95	5,82	38,05	C1 propanodiol dipropanoato	627	703	0,072	C10H18O4	1131	

39,15	4,83	39,23	atanodiol dipropanoato	536	681	0,717	C8H14O4	1147	
42,75	5,57	42,84	isobutil neopentil oxalato	640	770	0,209	C11H20O4	1197	
Ésteres				27 picos	2,351			0,151**	
8,10	2,14	8,14	ácido acético*	960	976	2,930	C2H4O2	687	665
9,15	2,13	9,19	ácido acético anidro	932	980	0,157	C4H6O3	704	
9,45	2,59	9,49	ácido propanóico*	940	940	1,550	C3H6O2	710	700
11,85	2,67	11,89	2-metil, ácido propanóico*	908	908	0,287	C4H8O2	753	732
13,35	2,95	13,40	ácido butanoico*	882	886	0,309	C4H8O2	780	789
16,50	2,96	16,55	3-metil, ácido butanoico*	796	857	0,010	C5H10O2	832	834
19,20	3,18	19,25	ácido pentanóico*	895	895	0,041	C5H10O2	875	879
26,25	3,39	26,31	ácido hexanóico*	879	879	0,017	C6H12O2	973	977
33,45	3,53	33,51	ácido heptanóico*	881	890	0,006	C7H14O2	1069	1071
40,65	3,62	40,71	ácido octanóico*	770	809	0,036	C8H16O2	1168	1167
54,00	3,73	54,06	n-ácido decanóico*	740	812	0,007	C10H20O2	1361	1371
66,15	3,83	66,21	ácido dodecanóico*	669	744	0,004	C12H24O2	1559	1559
77,10	3,95	77,17	ácido tetradecanóico	602	827	0,004	C14H28O2	1757	1769
87,15	4,07	87,22	n-ácido hexadecanóico*	893	907	0,164	C16H32O2	1958	1958
96,30	4,17	96,37	ácido octadecanóico*	665	751	0,010	C18H36O2	2160	2172
13,80	3,03	13,85	ácido butenóico	858	858	0,022	C4H6O2	788	
15,60	3,30	15,66	ácido butenóico	886	886	0,105	C4H6O2	818	
18,90	3,24	18,95	ácido pentenóico	667	886	0,022	C5H8O2	870	
22,05	3,61	22,11	2-metil, 2-ácido butenóico*	845	845	0,058	C5H8O2	917	941
39,90	4,87	39,98	ácido benzenocarboxílico*	849	886	0,142	C7H6O2	1157	1159
46,05	5,24	46,14	ácido benzenoacético*	644	823	0,007	C8H8O2	1244	1246
45,60	4,96	45,68	C1 ácido benzóico	662	858	0,065	C8H8O2	1237	
47,40	4,99	47,48	C1 ácido benzóico	683	754	0,023	C8H8O2	1263	
61,05	5,74	61,15	C2 ácido benzóico	669	746	0,020	C9H10O2	1475	
70,50	6,75	70,61	4-hidroxi, ácido benzenopropanóico*	698	746	0,055	C9H10O3	1635	1654
32,55	8,11	32,69	oxotetrafurano ácido carboxílico	832	832	0,038	C5H6O4	1058	
45,00	6,70	45,11	dihidroxi ácido benzóico	556	703	0,034	C7H6O4	1229	
34,50	5,70	34,60	C1 ciclopenteno ácido carboxílico	623	709	0,020	C7H10O2	1083	
19,20	4,21	19,27	etoxi ácido acético	725	741	0,023	C4H8O3	875	
24,60	4,41	24,67	oxo-ácido pentanóico	788	852	0,016	C8H12O3	951	
Ácidos carboxílicos				30 picos	6,181			5,637**	
13,35	4,58	13,43	butanodial	895	923	0,522	C4H6O2	780	
19,35	4,43	19,42	2,4-hexadienal*	735	836	0,019	C6H8O	877	879
18,00	3,71	18,06	Hexanal*	732	732	0,033	C6H10O	856	856
18,00	4,89	18,08	Heptanal	793	796	0,036	C8H16O	856	
50,10	5,82	50,20	3-fenil, 2-propenal*	842	844	0,109	C9H8O	1302	1273
53,55	6,28	53,65	C1 fenil propenal	767	778	0,220	C10H10O	1355	
12,00	3,50	12,06	hidroxi butanal	948	948	0,180	C4H8O2	756	
15,15	4,08	15,22	3-furaldeído*	930	951	0,011	C5H4O2	811	815
16,35	4,37	16,42	Furfural*	963	963	0,744	C5H4O2	830	834
32,40	5,08	32,48	C2 furaldeído	767	879	0,020	C7H8O2	1055	
39,15	6,81	39,26	furanyl propenal	767	801	0,040	C7H6O2	1147	
50,40	6,31	50,51	5-acetoxi metil, 2-furaldeído*	643	818	0,010	C8H8O4	1306	1304
63,30	7,14	63,42	benzofuranil acetaldeído	757	844	0,022	C10H8O2	1512	
25,20	5,01	25,28	Benzaldeído*	948	948	0,356	C7H6O	959	968

31,50	5,33	31,59	Benzenoacetaldeído*	845	850	0,015	C8H8O	1043	1051
33,30	5,16	33,39	2-metil, banzaldeído*	911	918	0,026	C8H8O	1067	1067
34,35	5,21	34,44	4-metil, banzaldeído*	798	857	0,009	C8H8O	1081	1079
51,15	5,79	51,25	C2 benzaldeído	727	865	0,073	C9H10O	1318	
60,00	6,16	60,10	C4 benzaldeído	632	719	0,004	C11H14O	1458	
31,50	5,17	31,59	2-hidroxi, banzaldeído*	868	869	0,046	C7H6O2	1043	1057
38,25	5,06	38,33	C1 hidroxi banzaldeído	701	830	0,019	C8H8O2	1135	
39,90	5,19	39,99	C1 hidroxi banzaldeído	803	886	0,021	C8H8O2	1157	
40,50	5,56	40,59	dihidroxi banzaldeído	697	818	0,023	C7H6O3	1166	
50,25	6,14	50,35	hidroxi banzaldeído	915	915	0,197	C7H6O2	1304	
53,85	6,48	53,96	hidroxi banzaldeído	963	966	1,919	C7H6O2	1360	
56,10	6,26	56,20	C1 hidroxi banzaldeído	685	834	0,057	C8H8O2	1395	
56,55	6,82	56,66	m-metoxi,p-hidroxi, banzaldeído*	872	872	0,060	C8H8O3	1402	1410
58,35	6,53	58,46	C1 hidroxi banzaldeído	846	846	0,146	C8H8O2	1431	
60,90	6,74	61,01	C2 hidroxi banzaldeído	787	853	0,012	C9H10O2	1473	
25,35	5,07	25,43	5-metil, 2-furanocarboxaldeído*	910	914	0,817	C6H6O2	961	965
26,55	4,82	26,63	5-metil, 2-furanocarboxaldeído*	767	894	0,037	C6H6O2	977	965
39,45	6,83	39,56	dihidro pirano carboxaldeído	679	842	0,018	C6H8O2	1152	
52,20	6,06	52,30	benzilidenomalonaldeído	758	846	0,024	C10H8O2	1334	
		Aldeídos		33 picos	5,847			2,294**	
31,65	5,43	31,74	C2 pentanodiona	689	856	0,079	C5H10O	1045	
48,30	5,05	48,38	isopropil pentanodiona	628	813	0,051	C8H14O2	1276	
8,85	2,87	8,90	hidroxi propanona	895	908	0,140	C3H6O2	699	
10,35	2,98	10,40	3-hidroxi 2-butanona*	946	946	0,038	C4H8O2	726	720
12,75	3,50	12,81	hidroxi butanona	883	914	0,077	C4H8O2	769	
15,75	3,77	15,81	4-hidroxi, 2-pentanona*	824	832	0,060	C5H10O2	820	818
16,80	3,64	16,86	4-metil, 4-hidroxi, 2-pentanona*	914	918	0,108	C6H12O2	837	841
23,85	4,71	23,93	hidroxi propanona	876	878	0,083	C3H6O2	941	
9,45	2,68	9,49	1-penten-3-ona*	820	820	0,031	C5H8O	710	683
11,70	3,10	11,75	3-penten-2-ona*	827	827	0,016	C5H8O	750	735
33,15	5,11	33,24	cetona ins	731	756	0,024	C8H14O	1065	
37,80	5,43	37,89	fenil, 2-propanona*	857	857	0,025	C9H10O	1128	1124
40,50	5,29	40,59	1-fenil, propanona*	778	893	0,019	C9H10O	1166	1174
55,80	4,81	55,88	C1 hidroxi fenil propanona	686	771	0,010	C10H12O2	1390	
50,70	6,05	50,80	4-fenil, 2-buten-2-ona*	540	667	0,118	C10H10O	1311	1330
13,20	4,10	13,27	ciclopentanona	790	793	0,014	C5H8O	777	
13,95	3,80	14,01	Ciclopentanona*	945	945	0,011	C5H8O	791	797
28,20	5,56	28,29	C1 ciclohexanona	695	705	0,031	C7H12O	999	
33,90	5,42	33,99	3-etil, 2-ciclopenten-1-ona*	820	848	0,205	C7H10O	1075	1082
38,10	5,07	38,18	etenil ciclohexanona	812	870	0,053	C8H12O	1132	
19,80	5,08	19,88	2-ciclopenteno-1,4-diona*	885	885	0,062	C5H4O2	885	884
30,15	5,10	30,24	C1 ciclopentanodiona*	927	927	0,566	C6H8O2	1025	1043
30,30	5,71	30,40	2-ciclohexeno-1,4-diona*	883	906	0,065	C6H6O2	1027	1032
30,75	5,98	30,85	C2 ciclobutenodiona	744	819	0,076	C6H6O2	1033	
16,50	4,62	16,58	2-ciclopenten-1-ona*	930	930	0,623	C5H6O	832	835
21,30	4,64	21,38	2-metil, 2-ciclopenten-1-ona*	951	951	0,201	C6H8O	907	910
23,10	5,12	23,19	Ciclohexenona*	930	937	0,066	C6H8O	931	939
25,50	5,33	25,59	3-metil, 2-ciclopenten-1-ona*	926	926	0,625	C6H8O	963	973
27,00	4,97	27,08	2-ciclohexen-1-ona*	685	715	0,068	C6H8O	983	885

27,60	4,86	27,68	C2 ciclopentenona	850	860	0,039	C7H10O	991	
28,05	4,78	28,13	C2 ciclopentenona	890	891	0,078	C7H10O	997	
29,25	5,41	29,34	C1 etenil ciclopentanona	765	784	0,012	C8H12O	1013	
29,70	5,16	29,79	C2 ciclopentenona	854	870	0,059	C7H10O	1019	
31,05	5,15	31,14	2,3-dimetil, 2-ciclopenten-1-ona*	895	895	0,285	C7H10O	1037	1040
32,40	5,47	32,49	C1 ciclohexenona	942	942	0,055	C7H10O	1055	
33,00	4,64	33,08	C3 ciclopentenona	690	818	0,025	C8H12O	1063	
34,80	4,83	34,88	C2 ciclohexenona	553	787	0,023	C8H12O	1087	
34,95	4,90	35,03	2,3,4-trimetil, 2-ciclopenten-1-ona*	789	819	0,037	C8H12O	1089	1071
36,15	4,90	36,23	C2 ciclohexadienona	729	766	0,076	C8H10O	1105	
36,75	5,58	36,84	C2 ciclohexenona	735	763	0,005	C8H12O	1114	
40,50	6,04	40,60	C2 ciclohexenona	712	756	0,041	C8H12O	1166	
39,00	5,72	39,10	ciclooctadienona	641	686	0,073	C8H10O	1145	
22,50	4,89	22,58	2-hidroxi, 2-ciclopenten-1-ona*	867	963	0,018	C5H6O2	923	927
43,95	7,20	44,07	hidroxi cicloheptatrienona	658	732	0,042	C7H6O2	1214	
37,05	5,05	37,13	3-etil, 2-hidroxi, 2-ciclopenten-1-ona*	862	870	0,073	C7H10O2	1118	1140
45,45	6,57	45,56	C2 hidroxi ciclopentenona	675	950	0,019	C7H10O2	1236	
53,55	5,72	53,65	hidroxi cicloheptatrienona	767	819	0,031	C7H6O2	1355	
61,95	6,85	62,06	C2 oxobutil ciclohexanona	627	661	0,016	C12H20O2	1490	
66,00	7,53	66,13	C1 propenil furanona	689	755	0,064	C8H10O2	1557	
22,05	6,53	22,16	2(5)-furanona*	947	947	0,323	C4H4O2	918	918
23,55	5,96	23,65	5-metil, 2(5H)-furanona*	921	921	0,242	C5H6O2	937	938
26,55	6,24	26,65	3-metil, 2(5H)-furanona*	782	787	0,198	C5H6O2	977	989
31,50	7,00	31,62	4-metil, 5H-furan-2-ona*	918	918	0,145	C5H6O2	1044	1052
36,45	6,51	36,56	C2 furanona	885	885	0,020	C6H8O2	1110	
21,75	6,45	21,86	dihidro 2-furanona*	962	977	0,221	C4H6O2	914	915
24,30	5,91	24,40	dihidro furanodiona	719	905	0,007	C4H4O3	947	
24,60	5,96	24,70	5-metil, dihidro 2(3H)-furanona*	747	865	0,006	C5H8O2	951	950
34,05	6,45	34,16	C2 dihidro furanona	798	798	0,211	C6H8O2	1077	
37,50	7,65	37,63	acetil dihidro furanona	878	878	0,031	C6H8O3	1125	
42,15	7,92	42,28	C1 hidroxi dihidro furanona	928	928	0,076	C5H8O3	1189	
16,35	4,25	16,42	2,5-furanodiona*	645	715	0,007	C4H2O3	830	830
21,60	4,67	21,68	1-furanil etanona*	930	930	0,129	C6H6O2	911	910
28,80	4,80	28,88	furanil propanona	807	810	0,001	C7H8O2	1007	1008
40,80	4,87	40,88	5-metil, 2 furanil, 2-butanona*	834	837	0,079	C9H12O2	1170	1160
49,80	6,19	49,90	hidroxi furanil etanona	616	692	0,137	C10H8O4	1297	
50,85	6,16	50,95	benzofuranona	805	811	0,198	C8H6O2	1313	
53,25	7,85	53,38	isobenzofuranona	902	902	0,074	C8H6O2	1351	
26,10	6,34	26,21	2H-piran-2-ona	895	895	0,343	C5H4O2	971	
43,05	6,52	43,16	C2 piranona	805	837	0,017	C7H8O2	1202	
30,90	7,28	31,02	dihidro piranona	883	883	0,037	C5H6O2	1036	
56,85	7,42	56,97	benzopiranona	767	802	0,021	C9H6O2	1407	
59,25	7,78	59,38	1-benzopiran-2-ona*	927	927	0,058	C9H6O2	1446	1432
66,60	7,52	66,73	C1 benzopiranona	830	853	0,009	C10H8O2	1567	
69,60	7,95	69,73	C1 benzopiranona	848	946	0,489	C9H8O2	1619	
66,75	7,95	66,88	hidroxi benzopiranona	565	831	0,024	C9H6O3	1570	
69,00	8,03	69,13	dihidro benzopiranona	673	769	0,020	C9H8O2	1608	
80,25	8,89	80,40	trihidroxi benzopiranona	720	755	0,053	C9H6O5	1818	

33,15	5,35	33,24	Acetofenona*	912	912	0,086	C8H8O	1065	1075
41,25	5,24	41,34	3-metil acetofenona*	896	910	0,043	C9H10O	1176	1157
51,00	5,04	51,08	C2 acetofenona	777	828	0,036	C10H12O	1315	
60,30	6,15	60,40	vinil fenil etanona	729	778	0,078	C10H10O	1463	
48,45	5,66	48,54	dihidro acetofenona	838	853	0,050	C8H8O3	1278	
70,65	6,86	70,76	Benzofenona*	863	872	0,071	C13H10O	1638	1621
40,35	5,47	40,44	2-hidroxi acetofenona*	815	841	0,024	C8H8O2	1164	1167
54,00	5,12	54,09	C2 hidroxi acetofenona	759	809	0,023	C10H12O2	1362	
56,10	6,45	56,21	hidroxi acetofenona	886	889	0,102	C8H8O2	1395	
59,10	6,66	59,21	4-hidroxi acetofenona*	897	897	0,180	C8H8O2	1443	1442
62,10	6,72	62,21	4-hidroxi 3-metoxi acetofenona*	763	884	0,009	C9H10O3	1492	1491
63,45	6,64	63,56	C1 hidroxi acetofenona	788	804	0,076	C9H10O2	1514	
56,25	6,48	56,36	C1 indanona	809	813	0,128	C10H10O	1397	
57,15	6,60	57,26	C1 indanona	796	808	0,068	C10H10O	1412	
57,45	6,73	57,56	C1 indanona	797	801	0,066	C10H10O	1416	
53,85	6,51	53,96	hidroxi indanona	787	791	0,689	C9H8O2	1360	
70,80	7,31	70,92	C1 hidroxi dihidro indenona	729	744	0,089	C10H10O2	1641	
48,75	6,69	48,86	2,3-dihidro, 1H-inden-1-ona*	946	952	0,621	C9H8O	1282	1307
51,30	6,20	51,40	C1 dihidro indenona	846	846	0,043	C10H10O	1320	
52,35	6,32	52,46	hexahidro indenona	677	850	0,009	C9H12O	1337	
70,80	7,75	70,93	C1 dihidro indenodiona	636	815	0,023	C10H10O2	1641	
76,65	7,65	76,78	Fluorenona*	760	922	0,009	C13H8O	1750	1752
25,50	4,68	25,58	1-acetiloxi, 2-butanona*	876	876	0,014	C6H10O3	963	969
27,15	4,88	27,23	4-acetiloxi, 2-butanona*	616	801	0,345	C6H10O3	985	985
48,75	5,54	48,84	acetiloxi pentenona	681	752	0,149	C7H10O3	1282	
18,60	4,48	18,67	2-propanona 1-hidroxi acetato*	915	949	0,080	C5H8O3	866	862
36,30	5,76	36,40	benzociclobutenona	843	877	0,033	C8H6O	1108	
41,55	5,53	41,64	tetrahidro pentalenona	789	803	0,013	C8H10O	1180	
44,85	5,33	44,94	C1 fenil acetona	561	787	0,007	C10H12O	1227	
55,20	6,70	55,31	dihidro naftalenona	787	833	0,010	C10H10O	1381	
56,70	7,11	56,82	C1 octahidro naftalenona	720	736	0,076	C11H18O2	1404	
62,10	6,31	62,21	hidroxi propiofenona	657	842	0,006	C9H10O2	1492	
		Cetonas		109 picos	11,049			6,553**	
7,80	2,38	7,84	isopropilamina	617	947	0,081	C3H9N	683	
21,75	4,77	21,83	metoxi etanoamina	897	999	0,009	C3H9NO	913	
22,80	4,68	22,88	C1 etanodiamina	875	924	0,063	C3H10N2	927	
23,55	5,99	23,65	triazol amina	533	958	0,091	C2H4N4	937	
24,30	4,79	24,38	amino butanol	726	852	0,048	C4H11NO	947	
24,90	4,72	24,98	amino butanol	765	787	0,093	C4H11NO	955	
32,40	4,62	32,48	C1 piridinamina	747	785	0,086	C6H8N2	1055	
32,85	5,54	32,94	piridinol	786	852	0,026	C5H5NO	1061	
34,50	5,64	34,59	piridona	755	929	0,007	C5H5NO	1083	
35,10	5,28	35,19	C3 dihidro pirazole	893	938	0,005	C6H12N2	1091	
36,90	5,44	36,99	propenil propano hidrazona	632	751	0,037	C6H12N2	1116	
51,15	6,50	51,26	nitrogenado	710	750	0,023	C9H7NO	1318	
12,75	3,77	12,81	formamida	743	751	0,212	C3H6N2O2	769	
38,55	6,27	38,65	benzil nitrila	821	900	0,010	C8H7N	1139	
45,90	6,53	46,01	benzeno propanonitrila	807	846	0,005	C9H9N	1242	1244
		Compostos nitrogenados		15 picos	0,795			0,005**	

13,95	3,33	14,01	2,3-butanodiol*	793	889	0,027	C4H10O2	790	789
28,65	5,45	28,74	octanol	738	762	0,033	C8H18O	1005	
52,20	5,74	52,30	C4 pentanodiol	678	730	0,069	C9H20O2	1334	
61,05	7,72	61,18	undecanol	701	713	0,410	C11H20O	1475	
35,40	6,33	35,51	ciclopentenodiol	615	615	0,044	C5H8O2	1095	
42,60	4,22	42,67	C1 ciclohexil propanol	772	818	0,014	C10H18O	1195	
50,25	6,89	50,36	ciclohexanodiol	606	614	0,022	C6H12O2	1304	
59,10	8,24	59,24	ciclooctanometanol	659	718	0,096	C9H18O	1444	
49,20	5,26	49,29	benzenodimetanol	753	787	0,059	C8H10O2	1289	
74,10	8,37	74,24	C4 benzenometanol	651	684	0,111	C12H18O	1703	
78,60	8,34	78,74	C4 benzenometanol	637	659	0,130	C12H18O	1786	
52,05	5,63	52,14	hidroxi benzeno metanol	739	757	0,035	C7H8O2	1332	
58,80	6,10	58,90	dihidro naftalenol	769	840	0,065	C10H10O	1438	
60,90	6,15	61,00	tetrahidro naftalenol	797	829	0,005	C10H12O	1472	
63,90	6,99	64,02	2-naftalenol*	855	874	0,042	C10H8O	1522	1521
71,10	7,16	71,22	C1 naftalenol	808	821	0,066	C11H10O	1647	
75,45	7,00	75,57	C2 naftol	654	769	0,015	C12H12O	1727	
20,25	4,78	20,33	tetrahidro furanodiol	714	727	0,059	C4H8O3	892	
24,00	4,31	24,07	2-isobutoxi, etanol *	658	761	0,039	C5H10O3	943	927
25,20	4,69	25,28	dipropanoato etanodiol	777	787	0,075	C8H14O4	959	
Álcoois				20 picos	1,417			0,107**	
25,65	5,32	25,74	derivado de açúcar	686	705	0,428	C5H10O5	965	
27,15	4,85	27,23	derivado de açúcar	640	640	0,371	C6H12O5	985	
29,10	5,24	29,19	derivado de açúcar	638	638	0,251	C6H12O5	1011	
30,90	6,04	31,00	derivado de açúcar	677	677	0,230	C5H10O5	1035	
32,10	4,79	32,18	derivado de açúcar	632	634	0,403	C7H14O4	1051	
43,50	6,94	43,62	derivado de açúcar	896	896	0,407	C6H8O4	1208	
44,10	6,17	44,20	derivado de açúcar	701	718	0,171	C10H12O6	1216	
46,80	7,08	46,92	derivado de açúcar	670	695	0,033	C6H12O5	1255	
49,80	6,04	49,90	derivado de açúcar	663	677	0,056	C6H12O5	1297	
64,95	7,36	65,07	derivado de açúcar	786	790	0,082	C6H10O5	1540	
Áçucres				10 picos	2,431			0**	
Totais				339 picos	100,00			55,850	

(¹⁺²t_R)^a: soma do tempo de retenção nas duas dimensões em minutos (soma do tempo da ¹D com o tempo da ²D); S^b: similaridade da biblioteca; R^c: similaridade modo reversa da biblioteca; A^d: área percentual calculada; LTPRI^e: índice retenção: IR_{calc.}=índice de retenção calculado para cada composto, IR_{lit.}= índice de retenção teórico referente à literatura (NIST).

* Identificação confirmada pelo LTPRI. A identificação dos demais compostos foi somente por comparação com os espectros da biblioteca do GCxGC/TOFMS (biblioteca Nist) e análise detalhada de cada espectro, não especificando as posições das ramificações e insaturações.;

**Soma das áreas percentuais dos compostos positivamente pelo LTPRI

Tabela 5: Identificação dos compostos do bio-óleo bruto catalítico do bagaço da cana-de-açúcar (BO BC CAT) por GCxGC/TOFMS.

¹ t _R (min)	² t _R (s)	¹⁺² t _R (min) ^a	Nome	S ^b	R ^c	A (%) ^d	Fórmula	LTPRI ^e	
								IR _{calc.}	IR Lit.
8,70	2,49	8,74	benzeno	978	978	0,856	C6H6	697	
18,30	3,39	18,36	etil benzeno*	953	953	1,737	C8H10	861	862
18,90	3,39	18,96	p-xileno*	911	911	3,023	C8H10	870	869
20,25	3,81	20,31	etenil benzeno*	954	954	1,244	C8H8	892	897
20,40	3,57	20,46	o-xileno*	945	945	0,864	C8H10	894	894

22,65	3,48	22,71	(1-metil, etil), benzeno*	899	900	0,046	C9H12	925	922
24,30	3,75	24,36	ciclopropil benzeno	907	920	0,069	C9H10	947	
24,90	3,57	24,96	propil, benzeno*	958	958	0,243	C9H12	955	952
25,50	3,66	25,56	1-etil, 4-metil, benzeno*	922	931	1,537	C9H12	963	960
25,95	3,60	26,01	C3 benzeno	915	915	0,024	C9H12	969	
26,85	3,77	26,91	1-etil, 2-metil, benzeno*	926	940	0,088	C9H12	981	980
26,85	3,99	26,92	isopropenil benzeno	869	869	0,071	C9H10	981	
27,60	4,03	27,67	propenil benzeno	921	923	0,129	C9H10	991	
27,75	3,80	27,81	1,2,3-trimetil, benzeno*	954	954	0,605	C9H12	993	999
27,90	4,01	27,97	C1 etenil benzeno	929	931	0,152	C9H10	995	
28,05	4,06	28,12	C1 etenil benzeno	938	940	0,591	C9H10	997	
29,25	3,82	29,31	butenil benzeno	823	857	0,007	C10H12	1013	
30,00	4,01	30,07	1,2,4- trimetil, benzeno	898	898	0,072	C9H12	1023	1023
30,15	3,65	30,21	1-etil, 2,4-dimetil, benzeno*	882	884	0,027	C10H14	1025	1022
30,30	4,16	30,37	1-etenil, 2-metil, benzeno*	917	920	0,386	C9H10	1027	
31,50	3,95	31,57	butenil benzeno	808	826	0,037	C10H12	1043	
31,65	4,73	31,73	C1 etenil benzeno	889	895	1,660	C9H8	1045	
31,95	3,91	32,02	butenil benzeno	893	895	0,047	C10H12	1049	
32,10	3,73	32,16	1-metil, 3-propil, benzeno*	859	859	0,038	C10H14	1051	1058
32,40	3,75	32,46	1-metil, 4-propil, benzeno*	942	942	0,380	C10H14	1055	1061
32,40	4,06	32,47	C1 propenil benzeno	839	862	0,019	C10H12	1055	
32,55	3,80	32,61	1,2-dietil, benzeno*	856	856	0,215	C10H14	1057	1055
33,30	3,85	33,36	1-metil, 4-propil, benzeno*	797	878	0,007	C10H14	1067	1061
33,45	4,03	33,52	C1 propenil benzeno	841	841	0,016	C10H12	1069	
34,20	3,89	34,26	4-etil, 1,2-dimetil, benzeno*	879	879	0,048	C10H14	1079	1085
34,20	4,06	34,27	butenil benzeno	896	896	0,010	C10H12	1079	
34,65	3,94	34,72	2-etil, 1,3-dimetil, benzeno*	882	882	0,009	C10H14	1085	1087
35,25	4,15	35,32	C2 etenil benzeno	923	923	0,086	C10H12	1093	
35,70	4,15	35,77	2-etenil, 1,4-dimetil, benzeno*	918	918	0,074	C10H12	1099	1099
36,30	4,11	36,37	1-etenil, 2,3-dimetil, benzeno*	848	861	0,004	C10H14	1107	1094
37,05	4,01	37,12	1,2,4,5-benzeno*	844	846	0,008	C10H14	1118	1129
37,65	4,20	37,72	C1 propenil benzeno	896	896	0,078	C10H12	1126	
38,25	4,26	38,32	C1 propenil benzeno	936	937	0,208	C10H12	1134	
39,15	4,01	39,22	C1 butenil benzeno	869	869	0,010	C11H14	1147	
39,30	3,85	39,36	C5 benzeno	828	828	0,032	C11H16	1149	
40,05	3,83	40,11	pentil, benzeno*	781	783	0,050	C11H16	1159	1154
40,65	4,10	40,72	pentenil benzeno	829	854	0,008	C11H14	1168	
41,10	4,08	41,17	C1 butenil benzeno	830	862	0,009	C11H14	1174	
42,15	4,15	42,22	C2 propenil benzeno	794	805	0,007	C11H14	1188	
42,75	4,32	42,82	C5 ins benzeno	882	896	0,067	C11H14	1197	
44,85	4,21	44,92	pentenil benzeno	867	901	0,014	C11H14	1227	
45,60	4,51	45,68	C2 propenil benzeno	840	842	0,030	C11H14	1237	
46,65	3,89	46,71	C6 benzeno	738	823	0,006	C12H18	1252	
47,25	3,87	47,31	C6 benzeno	850	852	0,018	C12H18	1261	
50,40	4,95	50,48	C6 benzeno	766	779	0,002	C12H18	1306	
52,80	4,77	52,88	hexadienil benzeno	798	799	0,010	C12H14	1343	
54,30	3,89	54,36	C7 benzeno	855	855	0,009	C13H20	1366	
60,90	3,91	60,97	octil, benzeno*	868	885	0,007	C14H22	1472	1468
67,05	3,96	67,12	nonil, benzeno*	845	845	0,001	C15H24	1574	1573

72,90	4,00	72,97	decil, benzeno*	822	822	0,001	C16H26	1679	1678
34,50	4,51	34,58	C1 indeno	742	827	0,350	C10H10	1083	
42,90	5,27	42,99	metilene indeno	539	773	0,198	C10H8	1199	
39,45	4,77	39,53	1-metil, 1H-indeno*	910	912	2,224	C10H10	1151	1172
46,35	4,82	46,43	C2 indeno	863	863	0,075	C11H12	1248	
47,40	4,75	47,48	C2 indeno	930	932	0,922	C11H12	1263	
47,70	4,82	47,78	C2 indeno	895	901	0,268	C11H12	1267	
48,15	4,86	48,23	C2 indeno	909	915	0,097	C11H12	1274	
48,60	5,14	48,69	C2 indeno	816	819	0,019	C11H12	1280	
48,75	4,94	48,83	C2 indeno	749	865	0,014	C11H12	1282	
50,70	4,71	50,78	C3 indeno	741	849	0,040	C12H14	1311	
53,85	4,75	53,93	C3 indeno	824	842	0,051	C12H14	1359	
54,30	4,84	54,38	C3 indeno	807	814	0,007	C12H14	1366	
54,90	4,75	54,98	C3 indeno	883	883	0,070	C12H14	1376	
55,20	4,83	55,28	C3 indeno	878	878	0,035	C12H14	1380	
31,05	4,37	31,12	Indano*	922	922	1,078	C9H10	1037	1036
38,85	4,42	38,92	5-metil, 2,3-dihidro, 1H-indeno*	918	918	0,352	C10H12	1143	1140
39,60	4,53	39,68	4-metil 2,3-dihidro 1H-indeno*	896	896	0,051	C10H12	1153	1142
42,00	4,23	42,07	C2 dihidro indeno	895	895	0,105	C11H14	1186	
42,30	4,28	42,37	C2 dihidro indeno	862	862	0,032	C11H14	1191	
43,05	4,39	43,12	C2 dihidro indeno	715	802	0,020	C11H14	1201	
45,15	4,30	45,22	C2 dihidro indeno	820	820	0,034	C11H14	1231	
48,00	4,61	48,08	C2 dihidro indeno	782	798	0,038	C11H14	1271	
37,80	4,50	37,88	dihidro naftaleno	901	907	0,034	C10H10	1128	
39,90	4,72	39,98	dihidro naftaleno	767	791	0,551	C10H10	1157	
40,65	5,05	40,73	1,2-dihidro naftaleno*	939	943	0,207	C10H10	1168	1166
43,05	4,63	43,13	C1 dihidro naftaleno	804	824	0,023	C11H12	1201	
43,65	4,74	43,73	C1 dihidro naftaleno	846	860	0,014	C11H12	1210	
49,05	4,72	49,13	C2 tetrahidro naftaleno	732	746	0,010	C12H16	1286	
50,25	4,80	50,33	C2 tetrahidro naftaleno	759	793	0,019	C12H16	1304	
51,90	4,49	51,97	C2 tetrahidro naftaleno	824	878	0,004	C12H16	1329	
57,00	4,76	57,08	C3 tetrahidro naftaleno	749	809	0,015	C13H18	1409	
57,15	4,74	57,23	C3 tetrahidro naftaleno	693	713	0,028	C13H18	1411	
42,15	5,47	42,24	Naftaleno*	919	921	3,637	C10H8	1189	1191
49,95	5,42	50,04	1-metil, naftaleno*	898	902	2,673	C11H10	1299	1299
51,00	5,66	51,09	2-metil, naftaleno*	918	921	0,188	C11H10	1315	1315
52,35	5,62	52,44	C1 naftaleno	794	830	0,013	C11H10	1336	
56,40	5,40	56,49	C2 naftaleno*	933	934	0,206	C12H12	1399	1413
58,65	5,81	58,75	etenil naftaleno	836	844	0,046	C12H10	1436	
57,15	5,37	57,24	2,6-dimetil, naftaleno*	938	942	0,147	C12H12	1411	1407
58,05	5,52	58,14	2,7-dimetil, naftaleno*	830	838	0,091	C12H12	1426	1410
59,40	5,60	59,49	C2 naftaleno	838	845	0,052	C12H12	1448	
60,30	5,84	60,40	C2 naftaleno	840	867	0,013	C12H12	1463	
62,40	5,30	62,49	C3 naftaleno	865	865	0,012	C13H14	1497	
63,30	5,32	63,39	C3 naftaleno	838	840	0,101	C13H14	1511	
64,95	5,46	65,04	C3 naftaleno	778	839	0,005	C13H14	1539	
66,15	5,50	66,24	C3 naftaleno	922	922	0,042	C13H14	1559	
62,25	6,36	62,36	Acenafteno*	846	906	0,014	C12H10	1494	1481
60,00	6,54	60,11	Bifenileno	884	887	0,011	C12H8	1458	

62,10	5,59	62,19	4-metil, 1,1-bifenil*	799	804	0,009	C13H12	1492	1492
62,70	5,66	62,79	difenil metano	915	920	0,020	C13H12	1502	
65,55	5,72	65,65	C1 bifenil	798	804	0,008	C13H12	1549	
68,10	6,49	68,21	Fluoreno*	899	899	0,036	C13H10	1592	1588
74,40	6,35	74,51	1-metil, 9H-fluoreno*	806	829	0,006	C14H12	1707	1719
74,55	6,44	74,66	2-metil, 9H-fluoreno*	889	889	0,007	C14H12	1710	1719
76,80	6,67	76,91	9-metil, 9H-fluoreno	872	880	0,019	C14H12	1752	
78,90	7,57	79,03	Fenantreno*	899	937	0,007	C14H10	1791	1790
79,50	7,50	79,63	Antraceno*	774	792	0,017	C14H10	1802	1800
85,50	7,35	85,62	1-metil, fenantreno*	882	890	0,013	C15H12	1924	1934
Hidrocarbonetos aromáticos				113 picos	29,375			21,292**	
8,55	1,95	8,58	HC sat	885	918	0,585	C6H14	694	
43,05	2,83	43,10	HC sat	722	900	0,003	C13H28	1201	
49,95	2,89	50,00	HC sat	765	845	0,000	C13H28	1299	
56,55	2,94	56,60	HC sat	833	854	0,003	C15H32	1401	
62,70	2,99	62,75	HC sat	894	894	0,005	C16H34	1501	
68,55	3,04	68,60	HC sat	759	869	0,003	C16H34	1598	
120,60	9,09	120,60	HC sat	909	912	0,916	C27H56	2698	
127,65	9,02	127,65	HC sat	893	893	0,093	C27H56	2790	
127,80	9,09	127,80	HC sat	907	907	0,304	C27H56	2792	
131,40	10,38	131,42	HC sat	878	878	0,146	C27H56		
131,55	10,46	131,57	HC sat	915	915	0,697	C31H64		
7,80	2,13	7,84	C1 ciclopentanono	902	902	2,361	C6H12	683	
8,70	2,21	8,74	ciclohexano	935	935	0,543	C6H12	697	
17,25	3,91	17,32	3-metil, ciclopentano*	913	919	0,038	C6H10O	844	848
35,10	2,88	35,15	C8 ciclopropano	868	868	0,020	C11H22	1091	
49,35	3,01	49,40	C8 ciclopropano	875	906	0,015	C12H24	1290	
Hidrocarbonetos saturados				16 picos	5,730			0,038**	
8,10	2,18	8,14	HC ins C6	791	805	0,064	C6H10	687	
8,10	2,38	8,14	HC ins C6	797	800	0,029	C6H6	688	
8,55	2,10	8,59	HC ins C7	917	917	0,152	C7H14	694	
8,85	2,26	8,89	HC ins C7	869	902	0,013	C6H10	699	
10,05	2,21	10,09	3-etil, penteno*	782	810	0,019	C7H14	720	707,6
11,55	2,55	11,59	HC ins C7	922	922	0,114	C7H10	747	
12,15	2,49	12,19	HC ins C7	866	871	0,015	C7H12	758	
13,05	2,59	13,09	HC ins C7	827	843	0,014	C7H12	774	
14,40	2,44	14,44	3-etil, 2 hexeno*	815	844	0,004	C8H16	798	790
14,55	2,45	14,59	HC ins C8	782	856	0,003	C8H16	801	
15,00	2,58	15,04	HC ins C8	805	809	0,004	C8H14	808	
16,50	2,89	16,55	HC ins C8	810	871	0,018	C8H12	832	
20,70	2,63	20,74	HC ins C9	886	886	0,012	C9H18	898	
20,85	2,64	20,89	3-noneno*	787	878	0,004	C9H18	901	899
21,30	2,65	21,34	HC ins C9	898	914	0,004	C9H18	907	
27,75	2,79	27,80	4-deceno (trans)*	887	887	0,017	C10H20	993	994
28,05	2,78	28,10	HC ins	860	881	0,008	C10H20	997	
28,65	2,80	28,70	2-deceno*	820	892	0,011	C10H20	1005	1013
35,55	2,89	35,60	HC ins C11	763	809	0,004	C11H22	1097	
42,45	2,95	42,50	5-dodeceno (Z)*	899	899	0,019	C12H24	1192	1176
55,95	3,06	56,00	HC ins C14	893	931	0,015	C14H28	1391	

61,95	3,12	62,00	HC ins C14	889	910	0,015	C14H28	1489	
62,25	3,10	62,30	HC ins C14	893	906	0,010	C14H28	1494	
8,10	2,24	8,14	C1 ciclopentadieno	936	937	0,425	C6H8	687	
8,40	2,20	8,44	C1 ciclopenteno	949	949	0,300	C6H10	692	
8,40	2,29	8,44	C1 ciclopentadieno	485	607	0,142	C6H12O	692	
9,30	2,34	9,34	ciclohexeno	941	948	0,116	C6H10	707	
11,55	2,48	11,59	4-metil, ciclohexeno*	725	787	0,011	C7H12	747	740
12,00	2,61	12,04	C1 ciclohexadieno	898	947	0,084	C7H10	755	
12,30	2,65	12,34	C1 ciclohexadieno	906	949	0,051	C7H10	761	
14,55	2,89	14,60	C3 ciclopenteno	795	798	0,018	C8H14	801	
14,70	3,25	14,75	cicloheptatrieno	868	910	0,007	C7H8	803	
17,25	2,87	17,30	C2 ciclohexadieno	872	878	0,032	C8H12	844	
17,40	2,73	17,45	C3 ciclopenteno	865	907	0,002	C8H14	846	
18,15	3,00	18,20	C2 ciclohexadieno	863	872	0,013	C8H12	858	
23,55	4,34	23,62	C1 ciclohepteno	765	807	0,093	C8H14	937	
24,15	4,36	24,22	Cicloocteno	785	797	0,082	C8H14	945	
34,35	4,89	34,43	C1 isopropil ciclohexeno	728	758	0,104	C10H18	1081	
40,05	5,23	40,14	azuleno	904	904	0,007	C10H8	1160	
Hidrocarbonetos insaturados				39 picos	2,053			0,086**	
7,80	2,33	7,84	etoxipropano	818	818	0,426	C5H12O	683	
9,45	2,36	9,49	trimetoxi metano	884	907	0,008	C4H10O3	709	
10,05	2,78	10,10	etoxi 1-propeno*	790	808	0,009	C5H10O	720	706
29,85	4,35	29,92	metoxi cicloheptatrieno	728	794	0,015	C8H10O	1021	
8,40	2,47	8,44	dioxolano	861	888	0,018	C3H6O2	692	
12,00	2,92	12,05	2-etil, dioxalano	842	849	0,016	C5H10O2	755	
28,35	4,80	28,43	benzodioxole	963	964	0,059	C7H6O2	1001	
8,85	2,53	8,89	dihidro pirano	829	829	0,077	C5H8O	699	
73,80	6,67	73,91	dibenzopirano	814	847	0,015	C13H10O	1696	
22,05	4,19	22,12	metoxi fenila*	939	939	0,099	C7H8O	917	915
28,95	4,29	29,02	2-metil, 1-metoxi benzeno*	786	807	0,009	C8H10O	1009	1013
29,70	4,38	29,77	3-metil, 1-metoxi benzeno*	910	910	0,120	C8H10O	1019	1028
34,35	5,28	34,44	fenil epoxi etano	782	796	0,473	C8H8O	1081	
36,30	4,88	36,38	C1 benzodioxole	721	766	0,064	C8H8O2	1107	
36,45	4,31	36,52	C2 metoxi benzeno	829	836	0,014	C9H12O	1109	
36,75	4,47	36,82	1-etil, 4-metoxi, benzeno*	831	831	0,038	C9H12O	1114	1099
37,20	4,43	37,27	C2 metoxi benzeno (iso)	752	836	0,016	C9H12O	1120	
38,70	4,82	38,78	etenil metoxi fenila	864	864	0,020	C9H10O	1141	
39,60	4,92	39,68	1-etenil, 4-metoxi benzeno*	863	863	0,019	C9H10O	1153	1154
40,65	5,30	40,74	1,3-dimetoxi benzeno*	826	841	0,012	C8H10O2	1168	1182
47,70	5,19	47,79	3,5-dimetoxi tolueno*	739	783	0,017	C9H12O2	1267	1274
49,20	5,27	49,29	etenil etoxi fenila	755	769	0,142	C10H12O	1289	
60,00	6,22	60,10	metoxi naftleno	815	864	0,014	C11H10O	1458	
26,10	4,53	26,18	2-acetil, 5-metil, furano*	857	943	0,020	C7H8O2	971	977
26,55	4,91	26,63	furano	800	968	0,011	C4H4O	977	
35,70	4,75	35,78	2-metil, benzofurano*	867	867	0,142	C9H8O	1099	1109
36,00	4,73	36,08	C1 benzofurano	911	911	1,163	C9H8O	1103	
39,15	5,13	39,24	C1 benzofurano	825	833	0,017	C9H8O	1147	
41,40	5,63	41,49	C1 benzofurano	830	831	0,043	C9H8O	1178	
42,00	4,80	42,08	C2 benzofurano (iso)	857	859	0,012	C10H10O	1187	

42,60	4,82	42,68	C2 benzofurano (iso)	825	835	0,007	C10H10O	1195	
43,20	4,77	43,28	C2 benzofurano (iso)	887	890	0,488	C10H10O	1203	
43,80	4,80	43,88	C2 benzofurano (iso)	901	903	0,271	C10H10O	1212	
44,25	4,79	44,33	4,7-dimetil, benzofurano*	855	860	0,819	C10H10O	1218	1220
44,70	4,90	44,78	C2 benzofurano (iso)	822	830	0,109	C10H10O	1225	
45,15	5,07	45,23	2-etenil, benzofurano*	807	834	0,014	C10H8O	1231	1220
45,30	4,94	45,38	C2 benzofurano (iso)	761	786	0,009	C10H10O	1233	
44,10	5,28	44,19	2,3-dihidro, benzofurano*	861	864	0,995	C8H8O	1216	1224
45,60	4,91	45,68	dihidro benzofurano	739	773	0,562	C8H8O	1237	
49,20	5,30	49,29	2-metil, 2,3-dihidro benzofurano*	707	734	0,250	C9H10O	1289	1306
50,10	5,26	50,19	2-metil, 2,3-dihidro benzofurano*	694	720	0,049	C9H10O	1301	1306
47,55	5,86	47,65	metoxi benzofurano	839	839	0,020	C9H8O2	1265	
47,70	6,62	47,81	isobenzofurano	830	836	0,043	C8H8O	1268	
53,25	5,86	53,35	benzodifurano	793	856	0,072	C10H6O2	1350	
53,55	5,86	53,65	C1 hidroxil benzofurano	822	844	0,017	C9H8O2	1355	
64,05	6,26	64,15	dibenzofurano	916	916	0,071	C12H8O	1524	1520,9
40,80	5,95	40,90	dihidro benzodioxin	832	872	0,007	C8H8O2	1170	
Éteres				47 picos	6,912			2,684**	
26,70	4,54	26,78	Fenol*	948	948	5,855	C6H6O	979	981
32,25	4,66	32,33	2-metil, fenol*	949	949	2,188	C7H8O	1053	1052
33,75	4,66	33,83	4-metil, fenol*	897	902	1,073	C7H8O	1073	1070
33,75	4,72	33,83	3-metil, fenol*	938	938	3,420	C7H8O	1073	1077
36,15	4,88	36,23	2,5-dimetil, fenol*	922	922	0,215	C8H10O	1105	1108
38,40	4,72	38,48	2-etil, fenol*	912	912	0,314	C8H10O	1137	1137
39,15	4,80	39,23	2,4-dimetil, fenol*	953	953	1,455	C8H10O	1147	1150
40,50	4,88	40,58	4-etil, fenol*	912	927	3,255	C8H10O	1166	1163
41,40	4,99	41,48	2,3-dimetil, fenol*	928	928	0,171	C8H10O	1178	1181
42,45	5,02	42,53	3,4-dimetil, fenol*	923	926	0,148	C8H10O	1193	1195
42,90	4,65	42,98	o-isopropil, fenol*	845	919	0,006	C9H12O	1199	1203
43,35	4,89	43,43	2,4,5-trimetil, fenol*	913	917	0,160	C9H12O	1205	1203
44,40	4,71	44,48	2-propil, fenol*	873	875	0,031	C9H12O	1220	1221
44,85	4,78	44,93	3-isopropil, fenol*	884	907	0,333	C9H12O	1227	1228
45,30	5,10	45,39	2,3,6-fenol*	885	885	0,020	C9H12O	1233	1246
45,60	4,87	45,68	4-etil, 3-metil, fenol*	915	929	0,459	C9H12O	1237	1239
45,90	4,83	45,98	2-etil, 6-metil, fenol*	924	929	0,120	C9H12O	1242	1236
46,65	5,09	46,73	p-alil, fenol*	747	782	0,170	C9H10O	1252	1254
46,95	4,83	47,03	4-propil, fenol*	898	898	0,312	C9H12O	1256	1260
47,25	5,05	47,33	p-isopropil, fenol*	810	824	0,066	C9H12O	1265	1247
47,70	5,00	47,78	C3 fenol	866	866	0,033	C9H12O	1267	
48,00	5,00	48,08	C3 fenol	880	880	0,017	C9H12O	1271	
48,30	5,08	48,38	C3 fenol	833	849	0,045	C9H12O	1276	
48,45	4,89	48,53	C4 fenol (856	858	0,013	C10H14O	1278	
49,50	4,92	49,58	5-isopropil, 2-metil, fenol*	854	854	0,079	C10H14O	1293	1298
50,10	5,30	50,19	C3 fenol	814	838	0,029	C9H12O	1301	
50,70	4,80	50,78	C4 fenol	804	836	0,175	C10H14O	1311	
51,75	4,83	51,83	2-metil, 6-propil, fenol*	832	858	0,047	C10H14O	1327	1320
52,05	4,81	52,13	C4 fenol	737	859	0,018	C10H14O	1331	
55,05	5,33	55,14	C1 propenil fenol	787	789	0,025	C10H12O	1378	
55,20	5,31	55,29	C1 alil fenol	848	849	0,083	C10H12O	1380	

57,60	5,41	57,69	C1 alil fenol	855	857	0,067	C10H12O	1419	
58,35	6,40	58,46	C4 fenol	704	781	0,012	C10H14O	1431	
58,65	5,85	58,75	C1 alil fenol	732	752	0,047	C10H12O	1436	
55,35	4,85	55,43	4-t-pentil, fenol*	756	774	0,005	C11H16O	1383	1393
75,00	7,28	75,12	p-fenil, fenol*	874	884	0,060	C12H10O	1719	1713
42,75	5,30	42,84	1,2-benzenodiol (catecol)*	913	928	2,349	C6H6O2	1197	1200
47,10	5,44	47,19	3-metil, 1,2-benzenodiol*	964	964	0,562	C7H8O2	1259	1263
49,05	5,42	49,14	4-metil, 1,2-benzenodiol*	947	947	0,878	C7H8O2	1286	1294
52,05	5,65	52,14	C1 benzenodiol	798	824	0,037	C7H8O2	1332	
55,35	5,50	55,44	4-etil, catecol*	931	936	0,676	C8H10O2	1383	1392
48,00	6,19	48,10	benzenodiol	842	850	0,349	C6H6O2	1272	
52,65	6,32	52,76	C1 benzenodiol	866	869	0,026	C7H8O2	1341	
53,40	5,47	53,49	C2 benzenodiol	795	806	0,059	C8H10O2	1353	
55,20	6,22	55,30	benzenodiol	788	842	0,006	C6H6O2	1381	
61,20	5,46	61,29	C3 benzenodiol	805	805	0,053	C9H12O2	1477	
50,55	5,33	50,64	2,3-dihidro 1H-inden-5-ol*	856	857	0,159	C9H10O	1308	1307
52,65	5,76	52,75	dihidro indenol	949	950	0,229	C9H10O	1341	
52,65	5,43	52,74	dihidro indenol	778	831	0,224	C9H10O	1341	
55,80	5,52	55,89	C1 indanol	771	841	0,027	C10H12O	1390	
57,75	5,71	57,85	C1 indanol	824	887	0,026	C10H12O	1421	
53,25	5,22	53,34	C1 naftol	780	781	0,136	C11H10O	1350	
55,20	5,24	55,29	C1 naftol	763	766	0,036	C11H10O	1380	
58,80	6,10	58,90	tetrahidro naftalenodiol	811	815	0,051	C10H12O2	1438	
60,30	6,15	60,40	dihidro naftalenol	815	889	0,138	C10H10O	1463	
62,10	6,01	62,20	metoxi naftalenol	755	792	0,006	C11H10O2	1492	
63,90	7,00	64,02	1-naftalenol*	858	858	0,055	C10H8O	1522	1517
85,95	8,38	86,09	2-hidroxi, fluoreno*	870	889	0,008	C13H10O	1934	1941
34,95	5,10	35,04	2-metoxi, fenol*	840	857	0,015	C7H8O2	1089	1090
36,30	5,76	36,40	acetil fenol	804	804	0,032	C8H6O	1108	
51,15	5,80	51,25	propenil acetato fenol	815	831	0,020	C9H10O	1318	
Fenóis				61 picos	26,684			24,665**	
7,95	2,32	7,99	propanoato de metila	953	953	0,163	C4H8O2	685	
10,65	2,66	10,69	butanoato de metila*	742	866	0,010	C5H10O2	731	727
11,25	2,84	11,30	2-butenoato de metila (Z)*	813	822	0,001	C5H8O2	742	726
11,55	3,10	11,60	vivil butenoato	965	965	0,274	C6H8O2	747	
12,60	3,05	12,65	2-butenoato de metila (E)*	923	923	0,018	C5H8O2	766	756
25,20	4,69	25,28	etenil propanoato	896	949	0,030	C5H8O2	959	
25,50	4,70	25,58	isobutil alil acido oxálico	886	957	0,003	C9H14O4	963	
26,25	4,92	26,33	furanocarboxílico de metila	845	925	0,011	C6H6O3	973	
32,70	4,91	32,78	acetato de fenila*	881	881	0,086	C8H8O2	1059	1068
35,40	4,93	35,48	benzoato de metila*	819	819	0,021	C8H8O2	1095	1096
82,95	5,53	83,04	1,2-benzenodicarboxilato de bi(2-metil, propil)*	853	854	0,019	C16H22O4	1871	1872
26,85	4,64	26,93	vinil hexadienoato*	717	835	0,019	C8H10O2	981	
Ésteres				12 picos	0,654			0,154**	
7,65	2,13	7,69	ácido acético*	965	965	2,725	C2H4O2	681	661
9,60	2,67	9,64	ácido propanóico*	879	902	1,238	C3H6O2	712	700
11,85	2,65	11,89	2-metil, ácido propanoico*	839	842	0,023	C4H8O2	753	732
13,35	2,93	13,40	ácido butanoico*	867	875	0,219	C4H8O2	780	789

13,95	3,05	14,00	2-ácido butenóico	843	849	0,030	C4H6O2	790	
15,60	3,30	15,66	ácido butenóico	864	902	0,033	C4H6O2	818	
16,50	3,00	16,55	3-metil, ácido butanoico*	834	861	0,004	C5H10O2	832	839
18,30	4,24	18,37	ácido propanóico anidrido	825	971	0,060	C6H10O3	861	
26,25	3,39	26,31	C3 ácido dicarboxílico	893	902	0,004	C6H10O4	973	
57,75	6,09	57,85	3-fenil, 2-ácido propenóico*	728	735	0,120	C9H8O2	1421	1435
			Ácidos carboxílicos	10 picos		4,457		4,330**	
8,40	2,64	8,44	butenal	932	932	0,431	C4H6O	692	
11,55	3,08	11,60	2-butenal, 2-metil (E)*	919	922	0,221	C5H8O	747	745
12,00	3,50	12,06	hidroxi butanal	952	952	0,037	C4H8O2	756	
12,15	3,18	12,20	2-pentanal (E)*	895	895	0,039	C5H8O	758	757
13,50	4,55	13,58	butanodial	898	907	0,006	C4H6O2	783	
16,35	3,38	16,41	2-etil, 2-butenal (trans)*	726	854	0,006	C6H10O	830	815
18,75	4,41	18,82	2,4-hexadienal (E,E)*	861	861	0,274	C6H8O	868	879
53,55	6,31	53,66	C1 fenil propenal	792	796	0,094	C10H10O	1355	
15,15	4,10	15,22	3-furaldeído*	937	937	0,114	C5H4O2	811	815
16,35	4,46	16,42	Furfural*	959	959	2,751	C5H4O2	830	832
34,50	5,24	34,59	C2 furaldeído (iso)	650	757	0,031	C7H8O2	1083	
39,15	6,79	39,26	furanil propenal	843	843	0,067	C7H6O2	1147	
24,30	4,45	24,37	ciclohexeno carboxaldeído	795	795	0,036	C7H10O	947	
21,90	4,57	21,98	5-metil, 2-furanocarboxaldeído*	876	876	0,096	C6H6O2	915	924
24,45	4,80	24,53	3-metil, 2-furanocarboxaldeído*	614	712	0,009	C6H6O2	949	954
25,35	5,07	25,43	C1 furanocarboxaldeído (iso)	904	909	0,286	C6H6O2	961	965
47,85	5,48	47,94	C1 benzenodicarboxaldeído	771	794	0,050	C9H8O2	1269	
64,50	5,95	64,60	C1 naftalenocarboxaldeído	748	826	0,029	C12H10O	1532	
49,80	4,74	49,88	benzofurano acetaldeído	815	875	0,053	C10H8O2	1297	
72,75	6,63	72,86	bifenil carboxaldeído	836	859	0,011	C13H10O	1677	
74,25	6,77	74,36	bifenil carboxaldeído	751	812	0,006	C13H10O	1705	
25,35	4,98	25,43	benzaldeído*	921	928	0,045	C7H6O	961	968
31,50	5,33	31,59	Benzenoacetaldeído*	919	927	0,015	C8H8O	1043	1051
33,30	5,16	33,39	4-metil benzaldeído*	928	929	0,099	C8H8O	1067	1079
39,45	5,46	39,54	C1 benzenoacetaldeído	856	859	0,023	C9H10O	1151	
39,60	5,03	39,68	C1 benzaldeído	853	855	0,080	C8H8O	1153	
40,35	5,60	40,44	Benzenopropanal*	848	860	0,022	C9H10O	1164	1162
41,40	5,13	41,49	2,4-dimetil, benzaldeído*	794	879	0,012	C9H10O	1178	1180
47,55	5,22	47,64	C2 benzaldeído	775	827	0,008	C9H10O	1265	
51,45	5,13	51,54	C3 benzaldeído	813	873	0,071	C10H12O	1322	
63,00	6,11	63,10	C4 benzaldeído	735	735	0,020	C11H14O	1507	
31,50	5,17	31,59	hidroxi benzaldeído*	943	943	0,138	C7H6O2	1043	1057
39,90	5,19	39,99	C1 hidroxi benzaldeído (iso)	890	897	0,040	C8H8O2	1157	
40,20	5,27	40,29	C1 hidroxi benzaldeído	830	853	0,007	C8H8O2	1162	
40,50	5,56	40,59	dihidroxi benzaldeído	826	833	0,021	C7H6O3	1166	
46,20	5,03	46,28	C2 hidroxi benzaldeído	746	827	0,007	C9H10O2	1246	
56,55	6,83	56,66	metoxi hidroxi benzaldeído (vanilina)*	909	909	0,032	C8H8O3	1402	1410
57,15	5,48	57,24	hidroxi propenil benzaldeído	708	719	0,067	C10H10O2	1411	
54,15	6,36	54,26	hidroxi acetato benzaldeído	779	786	0,155	C9H8O3	1364	
34,95	4,22	35,02	fenil propeniloxi benzaldeído	813	831	0,083	C16H14O2	1089	
34,95	4,79	35,03	oxo ciclopentenil acetaldeído	763	782	0,062	C7H8O2	1089	

56,40	5,58	56,49	hidroxi tetrahidronaftaleno carboxaldeído	806	813	0,029	C11H12O2	1399	
			Aldeídos	42 picos		5,684		4,159**	
8,55	2,45	8,59	3-metil, 2-butanona*	866	892	0,018	C5H10O	694	673
9,45	2,60	9,49	2-pentanona*	666	807	0,372	C5H10O	710	689
9,75	2,64	9,79	3-pentanona*	866	934	0,477	C5H10O	715	700
12,00	2,79	12,05	2-metil, 3-pentanona*	873	873	0,004	C6H12O	755	748
13,65	2,98	13,70	3-hexanona*	862	862	0,011	C6H12O	785	784
13,80	3,05	13,85	2-hexanona*	929	929	0,010	C6H12O	788	788
9,00	2,57	9,04	3-penten-2-ona*	916	937	0,110	C5H8O	701	697
9,45	2,67	9,49	Pentenona	775	789	0,077	C5H8O	710	
12,90	2,98	12,95	2-metil, 1-penten-3-ona*	884	920	0,075	C6H10O	771	748
14,40	3,24	14,45	4-metil, 3-penten-2-ona*	884	884	0,011	C6H10O	798	798
16,50	3,53	16,56	hexenona	856	862	0,046	C6H10O	832	
16,80	3,54	16,86	hexenona	890	890	0,072	C6H10O	837	
16,95	3,58	17,01	3-hexen-2-ona*	904	904	0,059	C6H10O	839	845
27,60	4,38	27,67	heptadienona	757	837	0,004	C7H10O	991	
9,60	2,80	9,65	metoxi propanona	848	913	0,023	C4H8O2	712	
10,35	2,99	10,40	3-hidroxi, 2-butanona*	942	960	0,015	C4H8O2	726	720
12,75	3,52	12,81	1-hidroxi, 2-butanona*	944	944	0,031	C4H8O2	769	748
16,95	3,64	17,01	4-metil, 4-hidroxi, 2-pentanona*	829	829	0,023	C6H12O2	839	841
13,95	3,82	14,01	Ciclopentanona*	972	972	0,477	C5H8O	791	797
16,80	3,84	16,86	2-metil, ciclopentanona*	865	880	0,061	C6H10O	837	836
20,40	4,51	20,48	Ciclohexanona*	922	922	0,031	C6H10O	894	895
28,05	4,64	28,13	benzociclobutenona	913	913	2,341	C8H6O	997	
30,15	5,05	30,23	cicloheptanona	806	806	0,077	C7H10O	1025	
30,15	5,10	30,24	3-metil, 1,2-ciclopentanodiona*	915	915	0,293	C6H8O2	1025	1043
31,80	4,61	31,88	3-isopropil, 2-ciclopenten-1-ona*	781	782	0,026	C8H12O	1047	1070
35,85	5,39	35,94	ciclooctanona	711	714	0,030	C8H12O	1101	
31,50	6,99	31,62	ciclopropil propanona	815	922	0,017	C6H10O	1044	
16,35	4,72	16,43	2-ciclopenten-1-ona*	941	941	3,556	C5H6O	830	835
19,05	4,10	19,12	C1 ciclopentenona (iso)	796	825	0,007	C6H8O	873	
19,65	5,12	19,74	2-ciclopenteno-1,4-diona*	880	880	0,112	C5H4O2	882	884
21,30	4,66	21,38	2-metil, 2-ciclopenten-1-ona*	961	961	1,267	C6H8O	907	910
23,10	5,14	23,19	2-ciclohexen-1-ona*	951	961	0,413	C6H8O	931	939
25,50	5,34	25,59	3-metil, 2-ciclopenten-3-ona*	950	950	0,761	C6H8O	963	973
27,75	4,83	27,83	C2 ciclopentenona (iso)	872	872	0,111	C7H10O	993	
27,90	4,88	27,98	C1 ciclohexenona	883	908	0,246	C7H10O	995	
28,35	4,72	28,43	C2 ciclopentenona (iso)	721	791	0,016	C7H10O	1001	
29,55	5,73	29,65	ciclohexenodiona	808	826	0,025	C6H6O2	1017	
29,70	5,16	29,79	C2 ciclopentenona (iso)	863	869	0,063	C7H10O	1019	
29,85	5,18	29,94	metileno ciclopentanona	867	867	0,026	C7H8O	1021	
30,30	5,72	30,40	2-ciclohexeno-1,4-diona*	904	930	0,149	C6H6O2	1027	1032
30,90	5,05	30,98	C1 ciclopentenil etanona	774	774	0,022	C8H12O	1035	
31,20	5,11	31,29	2,3-dimetil, 2-ciclopenten-1-ona*	886	886	0,229	C7H10O	1039	1040
31,50	4,64	31,58	1-(1-ciclohexen-1-il), etanona*	774	780	0,064	C8H12O	1043	1023
32,40	5,46	32,49	C1 ciclohexenona	947	947	0,062	C7H10O	1055	
33,00	4,64	33,08	2,3,4-trimetil, 2-ciclopenten-1-ona*	822	837	0,037	C8H12O	1063	1071
33,45	6,18	33,55	C1 ciclohexenona	673	699	0,050	C7H10O	1069	

33,90	5,42	33,99	3-etil, 2-ciclopenten-1-ona*	823	855	0,137	C7H10O	1075	1082
34,05	4,83	34,13	C2 ciclohexenona	783	791	0,011	C8H12O	1077	
34,95	4,89	35,03	C1 ciclopentenil etanona	779	804	0,017	C8H12O	1089	
36,00	4,93	36,08	C3 ciclopentenona	761	767	0,047	C8H12O	1103	
36,75	5,57	36,84	C2 ciclohexenona	738	805	0,003	C8H12O	1114	
37,05	5,00	37,13	C2 ciclohexadienona	722	750	0,028	C8H10O	1118	
37,05	5,04	37,13	C2 hidroxí ciclopentenona	875	877	0,028	C7H10O2	1118	
38,10	5,06	38,18	etilidenociclohexanona	820	853	0,027	C8H12O	1132	
41,55	5,52	41,64	tetrahidro pentalenona	727	757	0,026	C8H10O	1180	
42,45	4,80	42,53	C3 ciclohexenona	812	830	0,014	C9H14O	1193	
26,10	6,34	26,21	2H-piran-2-ona*	906	908	0,158	C5H4O2	971	973
59,25	7,79	59,38	2H-1-benzopiran-2-ona*	917	918	0,043	C9H6O2	1446	1432
22,20	6,50	22,31	2(5H)-furanona*	958	958	0,050	C4H4O2	920	916
23,70	5,92	23,80	5-metil, 2(5H)-furanona*	864	864	0,076	C5H6O2	939	938
23,70	5,89	23,80	3-metil, 2,5-furanodiona*	745	745	0,058	C5H4O3	939	949
26,55	6,24	26,65	3-metil, 2(5H)-furanona*	789	838	0,146	C5H6O2	977	989
30,75	6,04	30,85	C2 furanona	790	824	0,018	C6H8O2	1033	
30,90	5,84	31,00	C2 furanodiona	913	913	0,026	C6H6O3	1035	
36,45	6,51	36,56	C2 furanona	903	903	0,014	C6H8O2	1110	
21,60	4,68	21,68	1-(2-furanil) etanona*	955	955	0,339	C6H6O2	911	914
28,80	4,82	28,88	1-(2-furanil), 1-propanona*	853	853	0,010	C7H8O2	1007	1008
40,80	4,88	40,88	4-(5-metil-2-furanil), 2-butanona*	937	937	0,149	C9H12O2	1170	1160
21,75	6,45	21,86	dihidro, 2(3H)-furanona*	963	978	0,071	C4H6O2	914	915
26,70	6,50	26,81	metileno dihidro furanona	784	827	0,003	C5H6O2	980	
34,05	6,46	34,16	C2 dihidro furanona	791	791	0,015	C6H8O2	1077	
53,40	7,79	53,53	isobenzofuranona	876	880	0,018	C8H6O2	1353	
69,60	7,94	69,73	C1 benzofuranona	856	937	0,070	C9H8O2	1619	
65,85	6,69	65,96	dibenzofurano	784	787	0,023	C12H8O	1554	
33,15	5,35	33,24	Acetofenona*	957	957	0,304	C8H8O	1065	1075
38,55	5,14	38,64	3-metil, acetofenona*	866	866	0,015	C9H10O	1139	1157
41,25	5,24	41,34	4-metil, acetofenona*	886	890	0,046	C9H10O	1176	1190
43,95	4,91	44,03	2,4-dimetil, acetofenona*	774	818	0,042	C10H12O	1214	1221
48,90	5,30	48,99	4-etil, acetofenona*	802	808	0,038	C10H12O	1284	1274
51,00	5,05	51,08	C2 acetofenona	763	799	0,014	C10H12O	1315	
47,55	4,69	47,63	C1 etenil acetofenona	707	762	0,093	C11H12O	1265	
49,80	4,79	49,88	C1 etenil acetofenona	811	811	0,056	C11H12O	1297	
40,35	5,47	40,44	2-hidroxí acetofenona*	874	874	0,047	C8H8O2	1164	1167
42,75	3,62	42,81	hidroxí metoxi acetofenona	762	777	0,022	C9H10O3	1197	
58,35	5,45	58,44	dihidroxí acetofenona	677	760	0,020	C8H8O3	1431	
59,25	5,53	59,34	dihidroxí acetofenona	724	729	0,057	C8H8O3	1445	
63,45	6,64	63,56	C1 hidroxí acetofenona	800	820	0,007	C9H10O2	1514	
34,35	5,25	34,44	C3 fenil pentanediona	720	720	0,258	C14H18O2	1081	
37,80	5,44	37,89	fenil, 2-propanona*	903	908	0,072	C9H10O	1128	1124
44,85	5,33	44,94	C1 fenil propanona	810	810	0,095	C10H12O	1227	
45,00	5,32	45,09	fenil butanona	898	903	0,022	C10H12O	1229	
46,20	5,49	46,29	fenil butanona	886	886	0,018	C10H12O	1246	
54,45	5,20	54,54	C2 ciclopentil fenil propanona	684	705	0,037	C16H22O	1369	
59,10	6,66	59,21	hidroxí fenil butanona	804	812	0,013	C10H12O2	1443	
61,35	6,56	61,46	fenil, hexenona	783	787	0,010	C12H14O	1480	

48,75	6,70	48,86	dihidro indenona	952	960	0,971	C9H8O	1282	
51,30	6,21	51,40	C1 dihidro indenona	867	867	0,042	C10H10O	1320	
53,85	6,51	53,96	hidroxi indanona	750	778	0,107	C9H8O2	1360	
56,25	6,49	56,36	C1 indanona	815	820	0,040	C10H10O	1397	
18,60	4,49	18,67	1-acetiloxi, 2-propanona*	897	943	0,182	C5H8O3	866	862
27,15	4,90	27,23	4-acetiloxi- 2-butanona*	929	953	0,179	C6H10O3	985	985
50,85	6,16	50,95	benzofuranona	777	781	0,221	C8H6O2	1313	
42,30	6,05	42,40	naftalenodiona	763	879	0,005	C10H6O2	1191	
55,20	6,72	55,31	dihidro naftalenona	762	800	0,006	C10H10O	1381	
67,35	6,80	67,46	acenaftilenona	850	850	0,019	C12H8O	1579	
Cetonas				105 picos	16,686			10,851**	
8,70	2,54	8,74	tetrahidro piridina	723	733	0,260	C5H9N	697	
12,75	3,87	12,81	C6 amina	809	809	0,109	C6H15N	769	
14,40	3,10	14,45	propanodiamina	859	936	0,011	C3H10N2	798	
16,80	3,77	16,86	triazina	751	851	0,022	C3H3N3	837	
19,50	4,57	19,58	C1 piridazina	825	850	0,226	C5H6N2	880	
21,15	3,82	21,21	tetrazina	783	968	0,006	C2H2N4	905	
27,00	5,28	27,09	etenil piridina	918	918	0,028	C7H5N	983	
51,15	6,05	51,25	nitrogenado	787	820	0,033	C10H15NO	1318	
53,85	4,86	53,93	piridazina	843	980	0,006	C9H13NO	1359	
60,15	6,13	60,25	leucina	700	933	0,087	C6H13NO2	1460	
38,55	6,28	38,65	benzil nitrila*	874	874	0,029	C8H7N	1139	1137
45,90	6,55	46,01	benzeno propano nitrila*	849	891	0,005	C9H9N	1242	1244
8,85	2,88	8,90	Urea, methyl-	767	774	0,104	C2H6N2O	699	
30,75	5,98	30,85	C1 piridazona	768	784	0,096	C5H6N2O	1033	
34,35	4,99	34,43	hidroxi indazol	729	781	0,039	C7H6N2O	1081	
Compostos nitrogenados				15 picos	1,062			0,034**	
7,95	2,26	7,99	3-metil, 1-butanol*	600	697	0,248	C5H12O	685	700
8,40	2,45	8,44	ciclopropil etanol	851	870	0,019	C5H10O	692	
12,75	3,30	12,81	hexanol	780	912	0,003	C6H14O	769	
16,80	3,57	16,86	octanol	700	709	0,070	C8H18O	837	
25,50	3,97	25,57	C2 dioxanol	869	883	0,059	C6H12O3	963	
25,80	4,25	25,87	C2 dioxanol	883	883	0,027	C6H12O3	967	
32,10	4,27	32,17	etoxi propanol	725	803	0,009	C5H12O2	1051	
36,45	4,93	36,53	C1 hidroxi fenil etanol	759	810	0,205	C9H12O2	1110	
45,00	5,89	45,10	C1 benzenometanol	724	771	0,023	C8H10O	1229	
59,70	6,70	59,81	C3 benzenometanol	763	813	0,014	C10H14O	1453	
74,10	8,38	74,24	C4 benzenoetanol	700	751	0,025	C12H18O	1703	
Álcoois				11 picos	0,701			0,248**	
Totais				471 picos	100,000			68,540	

(¹⁺²t_R)^a: soma do tempo de retenção nas duas dimensões em minutos (soma do tempo da ¹D com o tempo da ²D); S^b: similaridade da biblioteca; R^c: similaridade modo reversa da biblioteca; A^d: área percentual calculada; LTPRI^e: índice retenção; IR_{calc.}=índice de retenção calculado para cada composto, IR_{lit.}= índice de retenção teórico referente à literatura (NIST).

* Identificação confirmada pelo LTPRI. A identificação dos demais compostos foi somente por comparação com os espectros da biblioteca do GCxGC/TOFMS (biblioteca Nist) e análise detalhada de cada espectro, não especificando as posições das ramificações e insaturações.;

**Soma das áreas percentuais dos compostos positivamente pelo LTPRI

Tabela 6: Identificação dos compostos da fração BOF1+F2 do bio-óleo bruto catalítico do bagaço da cana-de-açúcar (BO BC CAT) por GCxGC/TOFMS.

¹ t _R (min)	² t _R (s)	¹⁺² t _R (min) ^a	Nome	S ^b	R ^c	A (%) ^d	Fórmula	LTPRI ^e	
								IR _{Cal.}	IR _{Lit.}
12,85	2,93	12,90	Tolueno*	950	950	7,424	C7H8	771	771
18,85	3,35	18,91	etil, benzeno*	699	880	0,007	C8H10	869	866
66,85	3,94	66,92	C2 butenil benzeno	794	829	0,081	C12H16	1570	
67,00	3,95	67,07	nonil, benzeno*	825	833	0,181	C15H24	1573	1586
71,95	4,02	72,02	C11 benzeno	785	801	0,126	C18H30	1661	
72,70	3,98	72,77	C10 benzeno	805	805	0,251	C16H26	1675	
72,85	4,00	72,92	decil, benzeno*	842	855	0,388	C15H24	1678	1678
73,15	4,06	73,22	C10 benzeno	520	788	0,050	C16H26	1684	
76,90	4,01	76,97	C11 benzeno	637	798	0,063	C17H28	1753	
77,50	4,05	77,57	C11 benzeno	727	823	0,050	C17H28	1764	
78,55	4,02	78,62	C11 benzeno	842	856	0,185	C17H28	1784	
82,75	4,10	82,82	C12 benzeno	757	826	0,085	C18H30	1867	
83,50	4,07	83,57	C12 benzeno	853	853	0,076	C18H30	1882	
83,80	4,08	83,87	C12 benzeno	842	842	0,332	C18H30	1888	
88,45	4,14	88,52	C12 benzeno	655	798	0,031	C18H30	1985	
88,75	4,14	88,82	C12 benzeno	783	792	0,081	C18H30	1991	
93,25	4,17	93,32	C13 benzeno	727	825	0,027	C19H32	2090	
93,55	4,19	93,62	C14 benzeno	826	835	0,082	C20H34	2097	
98,05	4,25	98,12	C15 benzeno	739	819	0,076	C21H36	2200	
102,40	4,32	102,47	C14 benzeno	812	812	0,088	C20H34	2304	
106,60	4,38	106,67	C17 benzeno	788	798	0,023	C23H40	2412	
110,65	4,45	110,72	C19 benzeno	686	758	0,087	C25H44	2516	
62,65	5,67	62,74	3-metil, 1,1-bifenil*	609	861	0,083	C13H12	1501	1484
65,65	5,69	65,74	C1 bifenil	798	822	0,168	C13H12	1551	
67,60	5,89	67,70	C1 bifenil	726	866	0,366	C13H12	1583	
68,35	5,51	68,44	3,3-dimetil, bifenil*	607	839	0,030	C14H14	1596	1594
68,65	5,62	68,74	C2 bifenil	750	817	0,091	C14H14	1601	
68,95	5,58	69,04	4,4-dimetil, bifenil*	726	896	0,082	C14H14	1606	1608
69,40	5,64	69,49	3,3-dimetil, bifenil*	871	878	0,266	C14H14	1615	1597
70,75	6,05	70,85	etenil bifenil	721	838	0,004	C14H12	1640	
71,95	6,02	72,05	C2 bifenil	631	810	0,071	C14H14	1662	
74,05	5,79	74,15	C2 bifenil	860	867	0,316	C14H14	1701	
74,95	5,67	75,04	C3 bifenil	641	755	0,088	C15H16	1717	
74,95	6,23	75,05	etileno difenil	565	778	0,084	C14H12	1718	
75,25	6,22	75,35	C2 bifenil	694	796	0,127	C14H14	1723	
75,55	6,26	75,65	C2 bifenil	785	814	0,098	C14H14	1729	
75,85	6,27	75,95	C2 bifenil	858	865	0,511	C14H14	1734	
76,15	6,30	76,26	C2 bifenil	541	770	0,125	C14H14	1740	
76,90	5,79	77,00	C3 bifenil	527	760	0,016	C15H16	1754	
77,50	6,05	77,60	C3 bifenil	704	714	0,265	C15H16	1765	
78,10	5,89	78,20	C3 bifenil	741	813	0,104	C15H16	1776	
81,10	5,85	81,20	C4 bifenil	559	700	0,115	C16H18	1834	
76,00	5,61	76,09	C4 Dibenzil	698	851	0,053	C16H18	1737	
39,55	4,74	39,63	1,2-dihidro, naftaleno*	694	900	0,059	C10H10	1153	1166
57,25	5,32	57,34	1,4-dimetil, naftaleno*	533	858	0,114	C12H12	1413	1424

63,40	5,28	63,49	C3 naftaleno	887	887	0,445	C13H14	1513	
64,60	5,44	64,69	C3 naftaleno	632	836	0,027	C13H14	1533	
64,90	5,45	64,99	C3 naftaleno	746	861	0,069	C13H14	1538	
66,10	5,51	66,19	C3 naftaleno	914	914	1,047	C13H14	1558	
66,85	5,66	66,94	C3 naftaleno	727	835	0,137	C13H14	1571	
68,05	5,29	68,14	C4 naftaleno	808	893	0,129	C14H16	1591	
68,35	5,93	68,45	1,6,7-trimetil, naftaleno*	709	791	0,116	C13H14	1596	1573
68,95	5,22	69,04	C4 naftaleno	900	900	0,227	C14H16	1606	
69,10	5,25	69,19	C4 naftaleno	566	709	0,141	C14H16	1609	
69,10	6,30	69,21	isopropenil naftaleno	811	818	0,299	C13H12	1609	
69,55	6,39	69,66	propenil naftaleno	875	878	0,357	C13H12	1618	
70,60	5,38	70,69	C4 naftaleno	590	763	0,041	C14H16	1637	
71,80	5,47	71,89	C4 naftaleno	856	856	0,044	C14H16	1659	
73,00	5,87	73,10	C4 naftaleno	536	729	0,046	C14H16	1681	
73,00	5,55	73,09	C4 naftaleno	671	837	0,051	C14H16	1681	
73,90	5,23	73,99	1,6-dimetil, 4-isopropil, naftaleno*	629	804	0,023	C15H18	1698	1684
73,90	5,73	74,00	C4 naftaleno	619	817	0,090	C14H16	1698	
76,00	4,96	76,08	2,6-diisopropil naftaleno*	578	779	0,017	C16H20	1737	1736
76,15	5,45	76,24	C5 naftaleno	850	850	0,254	C15H18	1740	
76,45	6,08	76,55	C4 naftaleno	631	799	0,805	C14H16	1745	
82,90	7,26	83,02	1-fenil naftaleno*	737	846	0,051	C16H12	1871	1868
88,45	7,51	88,58	2-fenil, naftaleno*	924	925	0,890	C16H12	1986	1987
94,00	7,52	94,13	C1 fenil naftaleno	690	736	0,020	C17H14	2108	
87,10	4,66	87,18	C8 tetrahidro naftaleno	768	802	0,050	C18H28	1957	
68,05	6,49	68,16	Fluoreno*	878	878	1,252	C13H10	1591	1588
69,25	6,21	69,35	C1 fluoreno	877	889	0,163	C14H12	1612	
74,35	6,35	74,46	C1 fluoreno	887	887	0,378	C14H12	1707	
74,50	6,42	74,61	1-metil, 9H-fluoreno*	910	926	1,915	C14H12	1709	1719
74,95	6,52	75,06	C1 fluoreno	894	894	1,200	C14H12	1718	
75,40	6,10	75,50	C2 fluoreno	849	850	0,138	C15H14	1726	
75,55	6,69	75,66	2-metil, 9H-fluoreno*	900	900	0,708	C14H12	1729	1720
76,15	6,35	76,26	C2 fluoreno	742	855	0,125	C15H14	1740	
76,75	6,68	76,86	C1 fluoreno	881	890	2,042	C14H12	1751	
77,35	6,68	77,46	C1 fluoreno	815	819	0,055	C14H12	1762	
77,80	6,89	77,91	C1 fluoreno	851	871	0,043	C14H12	1771	
78,25	7,05	78,37	C1 fluoreno	796	848	0,045	C14H12	1779	
79,60	6,24	79,70	C2 fluoreno	809	821	0,213	C15H14	1804	
79,90	6,35	80,01	C2 fluoreno	756	775	0,167	C15H14	1810	
79,90	6,38	80,01	C2 fluoreno	837	837	0,109	C15H14	1810	
80,20	6,83	80,31	C2 fluoreno	603	812	0,292	C15H14	1816	
80,65	6,37	80,76	C2 fluoreno	863	903	0,898	C15H14	1825	
80,95	6,40	81,06	C2 fluoreno	830	866	0,680	C15H14	1831	
81,40	6,59	81,51	C2 fluoreno	564	796	0,289	C15H14	1841	
81,40	6,62	81,51	C2 fluoreno	532	776	0,126	C15H14	1841	
82,00	6,67	82,11	C2 fluoreno	835	865	0,292	C15H14	1853	
82,60	6,53	82,71	C2 fluoreno	874	893	0,246	C15H14	1865	
83,80	6,88	83,91	C2 fluoreno	594	813	0,078	C15H14	1889	
84,10	6,84	84,21	C2 fluoreno	822	859	0,004	C15H14	1895	

98,05	8,27	98,19	C1 fluoranteno	714	822	0,039	C17H12	2202	
100,15	8,86	100,30	C1 fluoranteno	715	809	0,039	C17H12	2252	
99,25	8,69	99,39	benzo fluoreno	873	887	0,180	C17H12	2231	
70,45	6,81	70,56	fenaleno	875	890	1,052	C13H10	1634	
67,00	6,41	67,11	fenaleno	876	879	0,103	C13H10	1573	
78,85	7,57	78,98	Fenantreno*	910	911	1,660	C14H10	1790	1790
84,70	7,31	84,82	C1 fenantreno	908	908	0,524	C15H12	1908	
85,45	7,37	85,57	C1 fenantreno	921	927	4,706	C15H12	1923	
85,90	7,91	86,03	ciclobutafenantreno	753	795	0,113	C15H10	1933	
86,20	7,69	86,33	1-metil, fenantreno*	911	920	0,625	C15H12	1939	1944
90,55	7,20	90,67	C2 fenantreno	877	898	0,147	C16H14	2031	
90,70	7,33	90,82	3,6-dimetil, fenatreno*	578	796	0,065	C16H14	2035	2027
91,15	7,25	91,27	C2 fenatreno	883	884	0,781	C16H14	2045	
91,90	7,61	92,03	C2 fenatreno	819	829	0,298	C16H14	2062	
92,20	7,54	92,33	C2 fenantreno	723	844	0,009	C16H14	2068	
93,10	7,77	93,23	C2 fenatreno	646	817	0,004	C16H14	2088	
93,85	7,88	93,98	C2 fenantreno	808	839	0,108	C16H14	2105	
95,95	7,15	96,07	C3 fenantreno	600	754	0,121	C17H16	2153	
96,70	7,44	96,82	C3 fenantreno	754	776	0,083	C17H16	2171	
99,40	7,14	99,52	C4 fenantreno	890	895	1,766	C18H18	2234	
94,30	6,23	94,40	C1 isopropil tetrahidro fenantreno	785	796	0,453	C18H22	2115	
101,20	8,67	101,34	dihidro ciclopentafenantreno	697	757	0,022	C17H14	2277	
102,40	7,76	102,53	ciclohexeno fenantreno	614	685	0,160	C18H16	2306	
79,45	7,50	79,58	Antraceno*	950	952	3,681	C14H10	1801	1800
85,00	7,43	85,12	C1 antraceno	911	912	0,734	C15H12	1914	
86,05	7,47	86,17	1-metil, antraceno*	911	912	0,544	C15H12	1936	1935
92,95	6,96	93,07	C3 antraceno	617	649	0,130	C17H16	2085	
98,35	7,99	98,48	propenil antraceno	515	789	0,010	C17H14	2209	
74,20	6,86	74,31	9,10-dihidro antraceno*	682	814	0,127	C14H12	1704	1685
82,15	6,55	82,26	C1 dihidro antraceno	728	739	0,416	C15H14	1856	
83,05	6,64	83,16	C1 dihidro antraceno	867	869	0,886	C15H14	1874	
85,90	6,28	86,00	C1 dihidro antraceno	520	804	0,021	C15H14	1932	
86,35	6,26	86,45	C2 dihidro antraceno	523	728	0,089	C16H16	1942	
87,10	6,96	87,22	C2 dihidro antraceno	536	677	0,058	C16H16	1958	
87,70	6,57	87,81	C2 dihidro antraceno	518	713	0,046	C16H16	1970	
89,20	6,08	89,30	C3 dihidro antraceno	646	751	0,125	C17H18	2001	
93,85	6,41	93,96	C4 dihidro antraceno	722	784	0,123	C18H20	2105	
81,40	5,90	81,50	C2 xanteno	618	846	0,066	C15H14O	1840	
81,85	5,97	81,95	C2 xanteno	816	897	0,100	C15H14O	1849	
82,45	5,99	82,55	C2 xanteno	573	826	0,245	C15H14O	1862	
82,60	5,97	82,70	C2 xanteno	737	742	0,314	C15H14O	1865	
82,90	6,07	83,00	C2 xanteno	775	790	0,097	C15H14O	1871	
92,65	8,46	92,79	Pireno*	897	898	0,185	C16H10	2079	2083
100,00	8,71	100,15	C1 pireno	847	863	0,185	C17H12	2249	
100,30	8,91	100,45	C1 pireno	619	810	0,068	C17H12	2256	
101,50	9,17	101,50	C1 pireno	889	891	0,068	C17H12	2281	
101,80	9,20	101,80	C1 pireno	839	861	0,033	C17H12	2288	
104,20	8,46	104,34	C2 pireno	703	831	0,007	C18H14	2352	

105,25	8,68	105,39	C2 pireno	680	819	0,082	C18H14	2379	
105,40	8,82	105,55	C2 pireno	541	768	0,061	C18H14	2383	
80,35	6,88	80,46	fenil indeno	745	826	0,006	C15H12	1819	
83,20	7,04	83,32	fenil indeno	797	822	0,058	C15H12	1877	
86,50	4,45	86,57	tetrahidro azuleno	746	798	0,070	C10H12	1944	
109,15	9,83	109,16	Criseno*	705	898	0,014	C18H12	2476	2472
Hidrocarbonetos aromáticos				147 picos	51,572			20,506**	
10,15	2,10	10,19	HC sat C6	537	788	0,131	C6H14	722	
10,30	2,11	10,34	HC sat C7	556	964	0,155	C7H16	725	
10,75	2,23	10,79	2,4,4-trimetil, 1-penteno*	637	641	0,482	C8H16	733	712
11,05	2,18	11,09	HC sat C8	864	883	0,696	C8H18	738	
11,50	2,24	11,54	3,3-dimetil, hexano*	645	699	0,743	C8H18	746	742
12,40	2,27	12,44	2,3-dimetil, hexano*	880	895	0,045	C8H18	762	758
12,70	2,26	12,74	2-metil, heptano*	878	878	0,143	C8H18	768	765
13,00	2,29	13,04	3-metil, heptano*	867	881	0,133	C8H18	773	773
68,65	3,03	68,70	HC sat C16	878	886	0,120	C16H34	1600	
74,05	3,09	74,10	HC sat C17	856	856	0,299	C17H36	1700	
79,45	3,13	79,50	HC sat C19	861	861	0,307	C19H40	1800	
79,90	3,03	79,95	HC sat C19	624	851	0,006	C19H40	1809	
84,40	3,19	84,45	HC sat C19	880	880	0,344	C19H40	1900	
89,20	3,24	89,25	HC sat C20	886	886	0,378	C20H42	2000	
93,70	3,31	93,76	HC sat C20	889	891	0,343	C20H42	2100	
98,05	3,36	98,11	HC sat	905	905	0,316	C21H44	2200	
102,25	3,42	102,31	HC sat	882	882	0,237	C21H44	2300	
110,05	3,56	110,11	HC sat	907	907	0,194	C27H56	2500	
117,25	3,70	117,31	HC sat C27	931	931	1,067	C27H56	2650	
124,30	4,21	124,37	HC sat C28	829	829	0,285	C28H58	2747	
10,90	2,33	10,94	metil, ciclohexano*	872	872	3,488	C7H14	735	727
10,75	2,26	10,79	C1 ciclopentano	649	719	0,921	C6H12	733	
11,35	2,36	11,39	etil, ciclopentano*	883	885	0,351	C7H14	744	736
11,50	2,27	11,54	C3 ciclopentano	844	844	0,743	C8H16	746	
11,80	2,31	11,84	1,2,3-trimetil, ciclopentano*	879	885	0,353	C8H16	752	748
13,45	2,45	13,49	1,3-dimetil, ciclohexano*	638	766	0,044	C8H16	781	787
Hidrocarbonetos saturados				26 picos	12,324			5,783**	
10,30	2,22	10,34	HC ins C7	883	883	0,178	C7H14	725	
12,40	2,66	12,44	1,3,5-heptatrieno*	568	865	0,062	C7H10	762	781
62,20	3,10	62,25	HC ins C14	576	874	0,095	C14H28	1493	
62,95	3,12	63,00	HC ins C16	533	806	0,015	C16H32	1505	
67,75	3,16	67,80	HC ins C16	670	870	0,157	C16H32	1585	
68,20	3,14	68,25	1-hexadeceno*	902	902	0,398	C16H32	1593	1592
68,80	3,17	68,85	HC ins C16	746	863	0,014	C16H32	1603	
70,75	3,13	70,80	HC ins C16	692	837	0,055	C16H32	1639	
71,05	3,14	71,10	HC ins	631	862	0,063	C14H28	1644	
73,00	3,23	73,05	HC ins C16	719	859	0,074	C16H32	1681	
73,30	3,22	73,35	HC ins C16	873	873	0,239	C16H32	1686	
73,75	3,19	73,80	HC ins C16	909	909	0,709	C16H32	1694	
74,35	3,22	74,40	HC ins C18	816	892	0,136	C18H36	1706	
75,10	3,25	75,15	HC ins C18	683	815	0,034	C18H36	1719	
75,85	3,09	75,90	HC ins C17	821	821	0,522	C16H32	1733	

76,45	3,13	76,50	HC ins	756	768	0,220	C13H26	1744	
76,60	3,20	76,65	HC ins	708	847	0,134	C15H30	1747	
77,05	3,21	77,10	HC ins C18	546	834	0,202	C18H36	1756	
78,25	3,28	78,30	HC ins C18	742	834	0,023	C18H36	1778	
78,55	3,27	78,60	HC ins C18	901	906	0,269	C18H36	1783	
78,70	3,26	78,75	HC ins	879	891	0,297	C16H32	1786	
79,00	3,25	79,05	HC ins C18	928	928	0,805	C18H36	1792	
79,60	3,27	79,65	3-octadeceno (E)*	847	889	0,096	C18H36	1803	1795
80,35	3,30	80,41	HC ins C18	682	868	0,043	C18H36	1818	
81,70	3,25	81,75	HC ins C18	747	865	0,222	C18H36	1845	
82,30	3,29	82,35	HC ins C18	712	820	0,195	C18H36	1858	
83,20	3,33	83,26	HC ins C18	764	859	0,110	C18H36	1876	
83,50	3,32	83,56	9-nonadeceno*	843	871	0,292	C19H38	1882	1893
83,80	3,32	83,86	HC ins C18	898	898	0,130	C18H36	1888	
84,10	3,29	84,15	HC ins C18	932	932	0,570	C18H36	1894	
84,55	3,33	84,61	1-nonadeceno*	703	870	0,186	C19H38	1903	1895
85,30	3,36	85,36	HC ins C19	743	854	0,036	C19H38	1919	
88,30	3,38	88,36	HC ins C19	803	867	0,183	C19H38	1981	
88,90	3,35	88,96	HC ins C19	899	900	0,708	C18H36	1994	
89,35	3,38	89,41	HC ins C20	724	844	0,066	C20H40	2003	
92,95	3,43	93,01	HC ins C20	817	876	0,156	C20H40	2083	
93,10	3,43	93,16	HC ins C20	745	845	0,156	C20H40	2087	
93,40	3,41	93,46	HC ins C20	889	889	0,500	C20H40	2093	
93,85	3,43	93,91	HC ins C21	627	844	0,046	C21H42	2103	
95,65	3,41	95,71	HC ins C22	503	826	0,056	C22H44	2145	
97,30	3,49	97,36	HC ins C22	763	880	0,182	C22H44	2183	
97,75	3,48	97,81	1-docoseno*	923	923	0,463	C22H44	2193	2196
98,20	3,49	98,26	HC ins C22	689	862	0,036	C22H44	2204	
101,95	3,54	102,01	HC ins C22	909	912	0,394	C22H44	2293	
106,00	3,59	106,06	HC ins	906	907	0,399	C22H44	2396	
109,90	3,66	109,96	HC ins	900	903	0,179	C22H44	2496	
110,20	3,69	110,26	HC ins	573	778	0,015	C23H46	2504	
113,05	3,74	113,11	HC ins	676	860	0,105	C22H44	2580	
113,50	3,74	113,56	HC ins	812	877	0,119	C22H44	2592	
113,65	3,72	113,71	HC ins	787	873	0,161	C23H46	2596	
117,85	3,80	117,91	HC ins	598	856	0,130	C22H44	2659	
120,10	3,89	120,16	HC ins	856	878	0,440	C22H44	2691	
120,55	3,88	120,61	HC ins	893	893	0,619	C22H44	2698	
120,85	3,91	120,92	HC ins	833	899	0,257	C22H44	2702	
11,65	2,57	11,69	C1 ciclohexadieno	848	863	0,169	C7H10	749	
11,95	2,62	11,99	C1 ciclohexadieno	764	927	0,035	C7H10	754	
81,85	3,37	81,91	HC ins	656	809	0,042	C10H18	1849	
Hidrocarbonetos insaturados				57 picos	12,197			1,497**	
15,40	2,93	15,45	2,3,5-trimetil, furano*	532	844	0,030	C7H10O	814	817
76,75	6,08	76,85	C2 nafto furano	794	796	0,587	C14H12O	1751	
77,20	6,27	77,30	C2 nafto furano	699	791	0,028	C14H12O	1759	
64,15	6,22	64,25	Dibenzofurano*	904	904	0,277	C12H8O	1526	1521
65,80	6,69	65,91	dibenzofurano	727	764	0,247	C12H8O	1554	
70,30	6,12	70,40	4-metil, dibenzofurano*	791	793	0,450	C13H10O	1631	1639

71,50	6,45	71,61	4-metil, dibenzofurano*	513	779	0,055	C13H10O	1654	1639
77,05	6,82	77,16	fenil benzofurano	883	889	1,080	C14H10O	1757	
95,35	8,10	95,49	nafto Benzofurano	831	889	0,056	C16H10O	2140	
96,10	8,39	96,24	nafto Benzofurano	810	843	0,034	C16H10O	2157	
97,90	8,64	98,04	nafto Benzofurano	673	852	0,052	C16H10O	2199	
64,15	5,90	64,25	nafto pirano	619	756	0,085	C12H10O	1526	
71,05	6,15	71,15	dibenzo pirano	861	874	2,195	C13H10O	1645	
71,65	6,40	71,76	dibenzo pirano	823	838	0,346	C13H10O	1657	
71,95	6,58	72,06	9H-xanteno*	894	896	0,112	C13H10O	1662	1661
72,25	6,43	72,36	xanteno	834	835	0,242	C13H10O	1668	
96,85	8,34	96,99	benzo xanteno	751	844	0,060	C16H10O	2174	
68,65	5,90	68,75	dimetoxi naftaleno	621	732	0,060	C12H12O2	1601	
70,90	5,91	71,00	bifenil metoxi	703	753	0,137	C13H12O	1643	
71,20	5,91	71,30	bifenil metoxi	645	736	0,077	C13H12O	1648	
			Éteres	20 picos		6,211		0,925	
78,55	6,49	78,66	fenil etenil fenol	685	765	0,210	C14H12O	1784	
79,60	6,62	79,71	fenil etenil fenol	775	838	0,102	C14H12O	1804	
80,35	6,67	80,46	fenil etenil fenol	731	771	1,153	C14H12O	1819	
81,25	6,84	81,36	fenil etenil fenol	560	722	0,202	C14H12O	1838	
			Fenóis	4 picos		1,668		0,000	
			(2-metil, propil), 1,2-						
82,90	5,52	82,99	benzenodicarboxilato*	881	882	0,171	C16H22O4	1870	1872
			Éster	1 pico		0,171		0,171	
72,70	6,63	72,81	1,1-bifenil, 4-carboxaldeído*	855	868	0,770	C13H10O	1676	1673
72,40	6,53	72,51	bifenil carboxaldeído	854	854	0,850	C13H10O	1671	
74,35	6,73	74,46	bifenil carboxaldeído	831	831	1,261	C13H10O	1707	
74,80	6,87	74,91	bifenil carboxaldeído	732	853	0,100	C13H10O	1715	
75,25	7,01	75,37	bifenil carboxaldeído	658	832	0,054	C13H10O	1723	
88,15	7,74	88,28	antracencarboxaldeído	761	829	0,186	C15H10O	1980	
89,20	7,80	89,33	antracencarboxaldeído	792	839	0,100	C15H10O	2002	
73,75	6,68	73,86	1,1-bifenil, 4-carboxaldeído*	834	834	1,641	C13H10O	1696	1673
			Aldeídos	8 picos		4,962		2,412**	
70,30	5,59	70,39	difenil etanona	736	882	0,052	C21H26O	1631	
76,45	6,02	76,55	bifenil etanona	762	787	0,829	C14H12O	1745	
78,40	6,44	78,51	bifenil etanona	771	841	0,703	C14H12O	1782	
85,60	6,54	85,71	benzil fenil etanona	716	799	0,133	C15H14O	1926	
88,15	6,49	88,26	difenil etenil etanona	649	694	0,244	C16H14O	1979	
94,60	6,62	94,71	C1 feni vinil etanona	760	774	0,582	C17H16O	2122	
100,45	6,46	100,56	acetil benzil fenil etanona	635	673	0,399	C17H16O2	2258	
83,35	6,81	83,46	fenil indanona	750	786	0,121	C15H12O	1880	
83,50	6,35	83,61	fenil indanona	658	745	0,021	C15H12O	1883	
85,60	6,72	85,71	fenil indanona	685	769	0,213	C15H12O	1926	
79,30	6,77	79,41	antracenona	818	818	0,315	C14H10O	1798	
94,60	8,70	94,75	C1 antracenodiona	748	857	0,009	C15H10O2	2123	
67,30	6,79	67,41	acenaftenona	842	842	0,488	C12H8O	1579	
79,30	6,54	79,41	C2 acenaftenona	756	778	0,559	C14H12O	1798	
79,90	6,61	80,01	C2 acenaftenona	729	745	0,285	C14H12O	1810	
70,60	6,86	70,71	Benzofenona*	755	801	0,116	C13H10O	1637	1621
77,50	6,08	77,60	oxotetrametileno naftaleno	511	544	0,788	C14H12O	1765	

80,35	6,70	80,46	oxotetrametileno naftaleno	531	588	0,834	C14H12O	1819
94,75	7,82	94,88	acetoantraceno	611	721	0,049	C16H12O	2126
Cetonas			19 picos	6,739				0,116**
74,95	6,55	75,06	nitrogenado	511	620	1,133	C14H13NO	1718
76,90	7,18	77,02	nitrogenado	706	765	0,041	C11H10N2O2	1754
77,50	6,12	77,60	nitrogenado	703	941	0,839	C13H12N2	1765
Compostos nitrogenados			3 picos	2,013				0,000**
77,20	6,77	77,31	fenantrol	395	535	0,866	C14H10O	1759
78,10	6,47	78,21	C2 fluorenol	664	722	0,557	C15H14O	1776
78,10	6,44	78,21	fenantrenol	669	677	0,389	C14H10O	1776
85,75	6,31	85,86	dibenzo cicloheptenol	656	707	0,053	C15H12O	1929
88,15	6,53	88,26	dibenzo cicloheptenol	646	743	0,232	C15H12O	1979
88,90	6,56	89,01	fenantrenometanol	507	863	0,048	C15H12O	1995
Álcoois			6 picos	2,143				0,000**
Totais			291 picos	100,000				31,410

(¹⁺²t_R)^a: soma do tempo de retenção nas duas dimensões em minutos (soma do tempo da ¹D com o tempo da ²D); S^b: similaridade da biblioteca; R^c: similaridade modo reversa da biblioteca; A^d: área percentual calculada; LTPRI^e: índice retenção: IR_{calc.}=índice de retenção calculado para cada composto, IR_{lit.}= índice de retenção teórico referente à literatura (NIST).

* Identificação confirmada pelo LTPRI. A identificação dos demais compostos foi somente por comparação com os espectros da biblioteca do GCxGC/TOFMS (biblioteca Nist) e análise detalhada de cada espectro, não especificando as posições das ramificações e insaturações.;

**Soma das áreas percentuais dos compostos positivamente pelo LTPRI

Tabela 7: Identificação dos compostos da fração BOF3 do bio-óleo bruto catalítico do bagaço da cana-de-açúcar (BO BC CAT) por GCxGC/TOFMS.

¹ t _R (min)	² t _R (s)	¹⁺² t _R (min)	Nome	S	R	A (%)	Formula	LTPRI ^e	
								IR _{Calc.}	IR _{Lit.}
12,85	2,93	12,90	Tolueno*	946	946	6,227	C7H8	771	769
18,85	3,33	18,91	p-xileno*	657	887	0,056	C8H10	869	869
58,30	5,96	58,40	fenil ciclohexeno	743	770	0,381	C12H14	1430	
39,55	4,74	39,63	1-metil, 1H-indeno*	886	913	0,158	C10H10	1153	1172
40,00	4,69	40,08	1,2,3,4-tetrahidro naftaleno**	765	814	0,090	C10D12	1159	1159
68,65	6,48	68,76	C4 tetrahidro naftaleno	665	670	0,710	C14H20	1601	
73,00	7,19	73,12	C4 naftaleno	755	769	0,131	C14H16	1682	
79,45	7,50	79,58	metileno fluoreno	534	887	0,018	C14H10	1801	
85,45	7,35	85,57	C1 antraceno	637	808	0,019	C15H12	1923	
88,30	7,96	88,43	C3 fenil benzeno	584	700	0,148	C15H16	1983	
90,85	8,35	90,99	C3 fenil benzeno	664	689	0,156	C15H16	1998	
75,10	6,25	75,20	C5 azuleno	697	719	0,437	C15H18	1720	
79,30	6,72	79,41	C5 azuleno	669	758	0,162	C15H18	1798	
82,90	6,97	83,02	C6 azuleno	667	757	0,152	C15H18	1871	
Hidrocarbonetos aromáticos			14 picos	8,843				6,531**	
10,15	2,57	10,19	HC sat	755	779	0,597	C9H20	722	
11,50	2,64	11,54	HC sat	514	778	0,077	C7H16	746	
13,00	2,29	13,04	3-metil, heptano*	564	920	0,038	C8H18	773	773
13,45	2,83	13,50	HC sat	660	923	0,117	C4H10	781	
32,65	2,60	32,69	HC sat	609	848	0,102	C12H26	1058	
35,95	2,68	35,99	HC sat	566	877	0,076	C13H28	1102	
10,30	2,22	10,34	C2 cicloprapano	774	887	0,087	C7H14	725	
10,90	2,35	10,94	metil, ciclohexano*	905	905	0,597	C7H14	735	736

69,85	4,39	69,92	C4 ciclohexano	742	742	0,045	C10H20	1623	
75,40	4,63	75,48	C14 ciclooctano	611	748	0,058	C22H44	1725	
Hidrocarbonetos saturados				10 picos	1,795			0,636**	
10,60	2,54	10,64	HC ins	561	851	0,077	C8H16	730	
14,20	2,85	14,25	HC ins	562	749	0,245	C8H14	795	
43,75	3,60	43,81	HC ins	601	788	0,044	C10H20	1198	
11,65	2,56	11,69	C1 ciclohexadieno	906	909	1,904	C7H10	749	
11,95	2,61	11,99	C1 ciclohexadieno	920	950	0,772	C7H10	754	
12,40	2,65	12,44	C1 ciclohexadieno	920	949	0,544	C7H10	762	
15,10	2,92	15,15	C3 ciclopenteno	684	848	0,404	C8H14	810	
59,35	5,06	59,43	C6 cicloheptatrieno	742	805	0,155	C13H20	1447	
Hidrocarbonetos insaturados				8 picos	4,143			0,000**	
10,30	2,46	10,34	2,5-dimetil tetrahidro furano (trans)*	810	902	0,379	C6H12O	725	727
11,35	2,60	11,39	C2 tetrahidro furano	639	773	0,057	C5H8O2	744	
14,50	2,90	14,55	2-etil 5-metil, furano*	809	887	0,237	C7H10O	800	802
15,40	2,93	15,45	2,3,5-trimetil, furano*	860	874	0,434	C7H10O	814	817
61,45	6,29	61,55	C1 furil furano	733	787	0,085	C9H8O2	1481	
70,60	4,42	70,67	butil idenona tetrahidrofurano	728	758	0,173	C8H12O2	1637	
84,10	7,97	84,23	fluoreno dihidro furano	506	774	0,077	C14H10O	1896	
56,35	6,11	56,45	C1 hidroxil benzofurano	815	838	0,713	C9H8O2	1400	
56,65	6,02	56,75	C1 hidroxil benzofurano	637	750	0,327	C9H8O2	1403	
65,20	6,09	65,30	C3 hidroxil benzofurano	794	806	0,290	C11H14O2	1543	
55,15	4,68	55,23	C6 metoxil benzeno	864	924	0,122	C13H18O	1398	
60,10	6,58	60,21	1-metoxil naftaleno*	575	744	0,014	C11H10O	1460	1434
64,30	5,89	64,40	metoxil bifenil	652	783	0,248	C13H12O	1528	
64,15	5,54	64,24	4-(1-propenil) 1,2-dimetoxil, benzeno*	747	747	0,549	C11H14O2	1526	1495
82,45	7,02	82,57	C1 fenil metoxil benzeno	750	764	0,315	C14H14O	1862	
84,40	7,05	84,52	C2 fenoxil benzeno	798	821	0,623	C14H14O	1901	
84,85	7,12	84,97	C1 metoxil difenil metano	737	807	0,532	C14H14O	1911	
90,55	8,20	90,69	metoxil fluoreno	713	870	0,112	C14H12O	1998	
55,45	4,82	55,53	C3 benzodioxol	762	767	0,126	C10H12O2	1398	
56,20	5,03	56,28	C2 vinil anisol	783	798	0,665	C11H14O	1400	
70,00	6,97	70,12	Naftopirano	574	733	0,245	C12H10O	1626	
75,55	7,53	75,68	Dibenzodioxin	702	767	0,112	C12H8O2	1729	
Éteres				22 picos	6,432			1,612**	
40,60	4,77	40,68	4-etil, fenol*	715	848	0,043	C8H10O	1167	1163
45,70	4,84	45,78	o-isopropil, fenol*	847	857	0,765	C9H12O	1194	1199
46,00	4,79	46,08	C3 fenol	870	871	0,396	C9H12O	1193	
47,05	4,79	47,13	C3 fenol	847	865	0,215	C9H12O	1191	
47,65	5,01	47,73	2,4,6-trimetil, fenol*	679	819	0,076	C9H12O	1189	1199
50,05	5,29	50,14	C3 fenol	808	870	0,088	C9H12O	1389	
50,80	4,78	50,88	C4 fenol	791	799	0,986	C10H14O	1390	
51,40	4,84	51,48	C4 fenol	839	865	0,315	C10H14O	1391	
53,20	4,96	53,28	C4 fenol	778	808	0,109	C10H14O	1394	
53,80	4,85	53,88	C4 fenol	822	824	0,068	C10H14O	1395	
55,15	4,76	55,23	4-(1,1-dimetil propil), fenol*	747	752	0,220	C11H16O	1398	1393
55,90	4,74	55,98	C5 fenol	750	778	0,271	C11H16O	1399	
49,15	5,18	49,24	alil fenol	841	843	0,799	C9H10O	1186	

49,75	5,24	49,84	propenil fenol	592	847	0,077	C9H10O	1184	
52,45	5,35	52,54	propenil fenol	810	869	0,344	C9H10O	1393	
51,55	5,09	51,63	C1 alil fenol	865	865	1,706	C10H12O	1391	
57,55	5,40	57,64	C1 alil fenol	872	872	1,934	C10H12O	1418	
55,00	5,25	55,09	C1 propenil fenol	785	805	0,479	C10H12O	1397	
55,15	5,30	55,24	C1 propenil fenol	727	810	0,136	C10H12O	1398	
59,05	5,26	59,14	C1 butenil fenol	671	751	0,148	C11H14O	1442	
60,10	5,20	60,19	C1 butenil fenol	635	772	0,099	C11H14O	1459	
63,85	6,40	63,96	o-hidroxi bifenil*	880	887	1,276	C12H10O	1521	1507
74,50	7,12	74,62	p-hidroxi bifenil*	826	828	0,234	C12H10O	1710	1713
69,55	6,21	69,65	C1 fenil fenol	721	735	0,334	C13H12O	1618	
70,15	6,33	70,26	C1 fenil fenol	869	901	1,243	C13H12O	1629	
79,15	7,15	79,27	C1 fenil fenol	864	869	2,322	C13H12O	1796	
51,25	5,76	51,35	dihidro indenol	723	835	0,070	C9H10O	1391	
57,85	5,68	57,94	C1 indanol	855	939	1,467	C10H12O	1423	
58,75	5,84	58,85	C1 indanol	848	916	0,478	C10H12O	1437	
60,85	6,49	60,96	dihidro naftalenol	829	922	0,783	C10H10O	1472	
69,85	7,17	69,97	C1 naftalenol	889	889	7,196	C11H10O	1623	
73,30	6,43	73,41	C1 naftalenol	654	835	0,097	C11H10O	1687	
74,80	6,46	74,91	C1 naftolenol	781	818	0,150	C11H10O	1715	
74,95	6,38	75,06	C1 naftol	828	844	0,369	C11H10O	1718	
71,20	7,11	71,32	C1 naftol	814	830	1,628	C11H10O	1648	
72,55	6,91	72,67	C2 naftol	753	754	0,370	C12H12O	1673	
76,30	7,01	76,42	C2 naftol	800	800	0,750	C12H12O	1743	
76,60	7,04	76,72	C2 naftol	618	690	0,306	C12H12O	1748	
76,75	7,28	76,87	C2 naftol	717	793	0,148	C12H12O	1751	
77,05	7,36	77,17	C2 naftol	814	817	0,401	C12H12O	1757	
79,60	6,93	79,72	C3 naftol	580	771	0,154	C13H14O	1804	
80,20	6,86	80,31	C3 naftol	610	787	0,215	C13H14O	1816	
82,60	7,02	82,72	C3 naftol	543	661	0,246	C13H14O	1865	
62,80	6,73	62,91	dihidroxi naftaleno	800	839	0,171	C10H8O2	1504	
67,00	5,98	67,10	tetrahidro dihidroxi naftaleno	719	758	0,305	C10H12O2	1573	
67,45	6,01	67,55	tetrahidro dihidroxi naftaleno	801	882	0,362	C10H12O2	1581	
71,20	6,21	71,30	dihidroxi naftaleno	671	828	0,050	C10H8O2	1648	
69,55	5,96	69,65	propenil metoxi fenol	713	833	0,107	C10H12O2	1618	
75,70	6,81	75,81	cicloheptatrienil fenol	654	774	0,099	C13H12O	1732	
85,00	8,17	85,14	2-hidroxi fluoreno*	871	880	1,141	C13H10O	1914	1941
Fenóis				50 picos	31,749			3,755**	
11,20	2,57	11,24	C6 alil ácido oxálico éster	536	815	0,247	C11H18O4	741	
71,80	5,27	71,89	ácido benzóico acetil fenil éster	693	864	0,373	C15H12O3	1659	
82,90	5,53	82,99	Bi (2-metil, propil), 1,2-	890	891	1,236	C16H22O4	1870	1872
112,0		112,0	benzenodicarboxaldeído éster*						
0	5,46	9	diisooctil benzenocarboxílico éster	842	882	0,095	C24H38O4	2553	
58,30	4,84	58,38	C1 metoxi ácido benzenoacético	862	945	0,190	C10H12O3	1430	
73,90	5,31	73,99	C2 oxo ácido benzeno acético	701	771	0,728	C10H10O3	1698	
58,30	5,31	58,39	éster	881	881	0,334	C11H12O2	1430	
67,45	6,63	67,56	alil fenil acetato	761	841	0,117	C12H10O2	1581	
68,50	6,56	68,61	naftalenol acetato	892	894	1,355	C12H10O2	1598	

79,45	6,74	79,56	bifenil acetato	853	857	0,194	C14H12O2	1801	
11,80	3,08	11,85	butenoato de vinil	931	965	0,632	C3FN	752	
72,85	4,42	72,92	C2 metoxi ciclohexil ácido acético éster	622	685	0,406	C11H20O3	1678	
85,60	3,85	85,66	C1 pentadecanoato de metila	882	882	0,646	C17H34O2	1925	
94,90	3,94	94,97	octadecanoato de metila	704	776	0,072	C15H30O2	2197	
			Ésteres	14 picos		6,626		1,236**	
62,95	6,12	63,05	C1 fenil ácido propenóico	716	727	0,584	C10H10O2	1506	
63,55	5,82	63,65	fenil ácido propenóico	706	786	0,324	C9H8O2	1516	
64,30	5,16	64,39	metoxi ácido benzoico	763	846	0,012	C9H10O3	1528	
69,55	4,34	69,62	C1 ácido ciclohexanocarboxílico dihidro naftanenodicarboxílico	697	697	0,904	C8H12O3	1617	
76,60	7,01	76,72	anidro	790	792	0,306	C12H8O3	1748	
			Ácidos carboxílicos	5 picos		2,131		0,000**	
11,65	3,05	11,70	2-metil, 2-butenal*	902	902	0,832	C5H8O	749	749
11,80	2,78	11,85	2-metil, pentanal*	918	935	0,112	C6H12O	752	746
12,40	3,17	12,45	2-pentenal*	690	884	0,064	C5H8O	763	757
12,55	2,91	12,60	Hexenal	763	816	0,227	C6H10O	765	
15,55	3,34	15,61	2-metil, 2-pentenal*	549	892	0,039	C6H10O	817	829
18,25	3,16	18,30	2-metil, hexanal*	797	866	0,099	C7H14O	860	887
57,10	3,75	57,16	Dodecanal*	685	876	0,033	C12H24O	1410	1409
63,40	3,78	63,46	Tridecanal*	614	858	0,067	C13H26O	1513	1512
74,95	3,84	75,01	Pentadecanal*	909	910	0,177	C15H30O	1717	1717
80,20	3,89	80,26	Hexadecanal*	825	854	0,171	C16H32O	1815	1818
85,30	3,92	85,37	aldeído saturado	798	901	0,180	C16H32O	1919	
90,10	3,97	90,17	aldeído saturado	725	826	0,015	C16H32O	1999	
94,75	4,02	94,82	aldeído saturado	868	888	0,162	C18H36O	2197	
103,30	4,14	103,37	aldeído saturado	720	830	0,128	C16H32O	2327	
107,35	4,19	107,42	aldeído saturado	713	864	0,153	C18H36O	2431	
111,25	4,25	111,32	aldeído saturado	852	854	0,327	C18H36O	2532	
115,00	4,31	115,07	aldeído saturado	751	844	0,115	C18H36O	2618	
122,05	4,64	122,12	aldeído saturado	687	811	0,069	C18H36O	2718	
130,45	6,14	130,52	aldeído saturado	863	863	0,548	C18H36O		
25,30	4,97	25,38	Benzaldeído*	890	908	0,286	C7H6O	961	968
57,55	5,90	57,65	C2 benzenodicarboxaldeído	615	765	0,055	C10H10O2	1418	
58,75	5,59	58,84	C2 benzenodicarboxaldeído	724	815	0,024	C10H10O2	1437	
58,90	6,37	59,01	C1 ciclopentapirano carboxaldeído	685	912	0,293	C10H8O2	1440	
58,45	6,49	58,56	C1 hidroxil benzaldeído	822	873	0,298	C8H8O2	1433	
60,85	6,75	60,96	C2 hidroxil benzaldeído	829	872	0,172	C9H10O2	1472	
82,60	7,06	82,72	fenoxil benzaldeído	572	792	0,246	C13H10O2	1865	
82,90	7,19	83,02	fenoxil benzaldeído	671	781	0,166	C13H10O2	1871	
58,30	6,37	58,41	C1 benzofurano carboxaldeído	854	869	0,192	C10H8O2	1430	
63,25	7,28	63,37	Naftalenocarboxaldeído	695	856	0,562	C11H8O	1511	
73,45	7,11	73,57	C1 naftalenocarboxaldeído	695	764	0,351	C12H10O	1690	
84,40	7,87	84,53	fluoreno carboxaldeído	859	864	0,365	C14H10O	1902	
			Aldeídos	31 picos		6,529		1,880**	

10,30	2,15	10,34	Butanona	831	958	0,037	C4H8O	725	
10,30	2,53	10,34	Pentanona	765	902	0,269	C5H10O	725	
11,50	2,74	11,55	metil isobutil cetona*	851	917	0,086	C6H12O	746	738
12,10	2,82	12,15	3-metil, 2-pentanona*	831	888	0,041	C6H12O	757	751
13,60	3,00	13,65	3-hexanona*	883	883	0,311	C6H12O	784	784
13,90	3,04	13,95	2-hexanona*	927	927	0,517	C6H12O	789	788
16,90	3,09	16,95	4-metil, 3-hexanona*	809	860	0,359	C7H14O	838	842
17,20	3,15	17,25	3-metil, 2-hexanona*	818	831	0,023	C7H14O	843	844
17,20	3,55	17,26	3-hexen-2-ona*	717	898	0,044	C6H10O	843	834
17,35	3,17	17,40	4-metil, 2-hexanona*	850	889	0,260	C7H14O	845	846
17,80	3,30	17,86	Heptenona	605	879	0,132	C7H12O	853	
17,95	3,23	18,00	5-metil, 2-hexanona*	874	918	0,260	C7H14O	855	857
19,30	3,45	19,36	1-hepten-3-ona*	800	805	0,138	C7H12O	876	876
19,90	3,33	19,96	3-heptanona*	947	947	0,327	C7H14O	886	885
20,20	3,38	20,26	2-heptanona*	935	935	0,389	C7H14O	891	889
29,05	5,09	29,13	2-octanona*	649	649	0,521	C8H16O	1011	992
74,05	3,84	74,11	cetona saturada	689	773	0,051	C12H24O	1700	
79,45	3,87	79,51	cetona saturada	775	810	0,098	C14H28O	1800	
81,70	3,71	81,76	6,10, 14-trimetil, 2-pentadecanona*	825	840	0,192	C18H36O	1846	1847
84,55	3,91	84,62	2-heptadecanona*	842	842	0,483	C17H34O	1903	1900
89,35	3,96	89,42	cetona saturada	677	803	0,023	C14H28O	2000	
94,00	4,00	94,07	cetona saturada	798	798	0,047	C12H24O	2196	
117,8		117,9							
5	4,37	2	cetona saturada	640	820	0,012	C19H38O	2659	
73,90	5,64	73,99	C1 oxabicyclo octenona	727	843	0,152	C8H10O2	1698	
83,05	4,39	83,12	C7 ciclopentanona	889	889	0,125	C12H22O	1873	
23,95	5,77	24,05	metileno dihidro furandiona	924	924	0,118	C5H4O3	943	
24,40	5,62	24,49	metileno dihidro furandiona	533	888	0,106	C5H4O3	949	
57,25	5,44	57,34	C2 isobenzofuranona	743	780	0,369	C10H10O2	1413	
60,10	6,05	60,20	C2 benzofuranona	637	753	0,100	C10H10O2	1459	
62,80	5,24	62,89	hexahidro indeno furanona	631	709	0,534	C11H12O2	1503	
70,30	7,85	70,43	nafto furanona	844	849	0,270	C11H6O2	1632	
52,30	5,07	52,38	C2 fenil etanona	802	842	0,103	C10H12O	1393	
54,55	5,17	54,64	C2 fenil etanona	827	838	0,326	C10H12O	1397	
58,60	5,33	58,69	C2 fenil etanona	725	831	0,122	C10H12O	1435	
58,75	6,10	58,85	vinil fenil etanona	821	821	0,420	C10H10O	1437	
60,55	5,44	60,64	C3 fenil etanona	724	802	0,202	C11H14O	1467	
61,75	6,03	61,85	C3 fenil etanona	751	761	0,200	C11H14O	1486	
62,80	5,29	62,89	C3 fenil etanona	814	849	0,443	C11H14O	1503	
62,80	5,69	62,89	C3 fenil etanona	800	818	0,415	C11H14O	1503	
53,80	5,66	53,89	fenil butenona	735	780	0,152	C10H10O	1395	
56,65	6,07	56,75	fenil butenona	692	738	0,257	C10H10O	1403	
67,45	6,34	67,56	C2 fenil pentenona	712	792	0,237	C13H16O	1581	
61,30	5,96	61,40	C1 hidroxil acetofenona	795	824	0,162	C9H10O2	1479	
65,80	5,92	65,90	C1 fenil ciclopentenona	683	769	0,159	C11H12N2	1553	
74,05	7,12	74,17	C1 fenil ciclopentenona	770	792	0,983	C12H12O	1701	
75,55	7,01	75,67	C1 fenil ciclopentenona	813	821	2,370	C12H12O	1729	
65,35	6,05	65,45	C2 dihidro indenona	773	778	0,769	C11H12O	1546	
66,10	6,11	66,20	C2 dihidro indenona	631	740	0,074	C11H12O	1558	

71,65	6,06	71,75	C3 dihidro indenona	700	748	0,231	C12H14O	1656	
59,50	6,27	59,60	C1 indanona	779	800	0,740	C10H10O	1450	
66,40	5,88	66,50	C1 metoxi indanona	725	748	0,639	C11H12O2	1563	
77,95	7,30	78,07	C2 metileno indanona	727	767	0,295	C12H12O	1774	
70,60	6,87	70,71	Benzofenona*	909	922	2,707	C13H10O	1637	1621
76,60	7,67	76,73	9H-fluoren-9-ona*	921	925	2,018	C13H8O	1749	1752
87,40	8,83	87,55	hidroxi fluorenona	652	773	0,116	C13H8O2	1964	
87,55	7,23	87,67	C2 fluorenona	595	728	0,129	C15H12O	1967	
82,90	7,52	83,03	Antracenona	877	881	0,322	C14H10O	1871	
83,65	7,49	83,77	Antracenona*	871	874	0,281	C14H10O	1886	1904
94,60	8,72	94,75	C1 antracenediona	592	818	0,033	C15H10O2	2197	
73,30	5,41	73,39	fenil formiloxi etanona	727	923	0,386	C9H8O3	1687	
76,75	7,51	76,88	dihidro fenalenona	699	775	0,133	C13H10O	1751	
84,55	7,68	84,68	acetil acenaftenona	659	776	0,202	C14H12O	1905	
90,25	8,08	90,38	C2 acenaftenona	666	666	1,103	C14H12O	1999	
81,10	7,38	81,22	Antrona	849	850	0,407	C14H10O	1835	
			Cetonas	64 picos		23,534		8,959**	
12,40	2,82	12,45	Pentanamina	815	815	0,064	C5H13N	762	
13,00	2,98	13,05	Nitrogenado	571	966	1,454	C2H3N3 C3H12N6O	773	
21,85	3,51	21,91	Nitrogenado	711	986	0,040	3	914	
55,75	5,13	55,84	Nitrogenado	704	734	0,119	C10H13NO	1399	
66,70	5,95	66,80	C1 indazol	697	783	0,153	C8H8N2	1568	
33,55	3,66	33,61	nitro ciclohexano	735	804	0,135	C6H11NO2	1070	
64,15	6,27	64,25	Quinolinona	582	786	0,192	C9H7NO	1526	
65,80	5,01	65,88	C1 hidroxi fenil amina	704	829	0,184	C7H9NO	1553	
64,30	7,26	64,42	Naftalenocarbonitrila	755	878	0,009	C11H7N	1529	1500
			Compostos nitrogenados	9 picos		2,350		0,009**	
14,50	2,84	14,55	2-hexanol*	859	859	0,192	C6H14O	800	801
16,30	2,87	16,35	Heptanol	920	920	0,856	C7H16O	829	
16,90	2,94	16,95	Heptanol	850	850	0,771	C7H16O	838	
18,55	2,99	18,60	Heptanol	787	849	0,186	C7H16O	864	
20,50	3,11	20,55	3-heptanol*	845	875	0,175	C7H16O	895	892
32,50	3,45	32,56	Heptanol	739	775	0,184	C7H16O	1056	
18,85	3,10	18,90	Heptanol	699	836	0,029	C7H14O	869	
16,15	2,95	16,20	Hexinol	653	710	0,238	C6H10O	826	
20,20	3,19	20,25	Heptanol	624	740	0,061	C7H14O	891	
25,15	3,33	25,21	Heptadienol	661	894	0,096	C7H12O	958	
16,90	3,12	16,95	C1 ciclopentanol	630	717	0,191	C6H12O	838	
60,25	6,08	60,35	Indenol	835	849	0,545	C9H8O	1462	
60,55	6,11	60,65	Indenol	828	852	0,579	C9H8O	1467	
54,10	4,83	54,18	C4 benzeno metanol	721	807	0,071	C11H16O	1396	
80,50	7,14	80,62	C1 naftil propanol	612	658	0,456	C14H16O	1823	
81,55	7,46	81,67	C1 fenil naftalenometanol	653	697	0,729	C19H18O	1844	
59,65	6,19	59,75	tetrahidro naftalenol	505	729	0,360	C10H12O	1452	
82,00	7,75	82,13	Dibenzofuranol	782	833	0,148	C12H8O2	1853	
			Álcoois	18 picos		5,867		0,367**	
			Totais	245 picos		100,00		24,990	

(¹⁺²t_R)^a: soma do tempo de retenção nas duas dimensões em minutos (soma do tempo da ¹D com o tempo da ²D); S^b: similaridade da biblioteca; R^c: similaridade modo reversa da biblioteca; A^d: área percentual calculada; LTPRI^e: índice retenção; IR_{calc.}=índice de retenção calculado para cada composto, IR_{lit.}= índice de retenção teórico referente à literatura (NIST).

* Identificação confirmada pelo LTPRI. A identificação dos demais compostos foi somente por comparação com os espectros da biblioteca do GCxGC/TOFMS (biblioteca Nist) e análise detalhada de cada espectro, não especificando as posições das ramificações e insaturações.;

**Soma das áreas percentuais dos compostos positivamente pelo LTPRI

Tabela 8: Identificação dos compostos da fração BOF4+F5 do bio-óleo bruto catalítico do bagaço da cana-de-açúcar (BO BC CAT) por GCxGC/TOFMS.

t_R (min)	2t_R (s)	$^{1+2}t_R$ (min) ^a	Nome	S ^b	R ^c	A (%) ^d	Fórmula	IR _{Cal.}	IR _{Lit}
8,70	2,48	8,74	Benzeno*	932	950	0,115	C6H6	697	663
12,75	2,94	12,80	Tolueno*	947	947	0,792	C7H8	769	769
18,30	3,32	18,36	etil benzeno*	753	781	0,014	C8H10	861	865
18,90	3,33	18,96	o-tolueno*	704	892	0,018	C8H10	870	863
31,65	4,70	31,73	1-propinil benzeno*	809	881	0,192	C9H8	1045	1058
39,45	4,77	39,53	butinil benzeno	926	928	0,272	C10H10	1151	
44,85	5,31	44,94	C5 benzeno	831	834	0,020	C11H16	1227	
57,60	5,40	57,69	C9 benzeno	759	766	0,039	C11H16	1419	
40,05	4,86	40,13	3-metil, 1H-indeno*	672	797	0,152	C10H10	1159	1155
47,10	4,75	47,18	C2 indeno	870	888	0,503	C11H12	1259	
43,05	6,48	43,16	C1 octahidro pentaleno	738	746	0,047	C9H16	1202	
Hidrocarbonetos aromáticos				11 picos		2,164		1,283**	
8,40	2,08	8,43	heptano	797	805	0,573	C7H16	692	
8,55	2,06	8,58	3-metil, hexano*	684	705	0,182	C7H16	694	673
9,00	2,09	9,03	HC sat	746	845	0,046	C4H9N	701	
8,70	2,21	8,74	ciclohexano	947	947	0,994	C6H12	697	
9,00	2,15	9,04	C2 ciclopentano	787	788	0,043	C7H14	701	
9,60	2,20	9,64	C2 ciclopentano	817	902	0,052	C7H14	712	
Hidrocarbonetos saturados				6 picos		1,889		0,182**	
8,10	2,37	8,14	haxadine	855	889	0,025	C6H6	688	
8,25	2,07	8,28	5-metil, 2-hexeno (Z)*	845	856	0,076	C7H14	690	681
8,55	2,10	8,59	3-etil, 2-penteno*	921	921	0,353	C7H14	694	708
9,60	2,34	9,64	HC ins C7	889	889	0,043	C7H10	712	
8,70	2,13	8,74	HC ins C7	608	797	0,271	C7H14	697	
8,70	2,18	8,74	HC ins C7	568	646	1,048	C7H12	697	
9,45	2,17	9,49	HC ins C7	906	910	0,051	C7H14	709	
10,05	2,23	10,09	HC ins C7	888	888	0,125	C7H14	720	
10,20	2,61	10,24	HC ins	738	785	0,083	C8H16	723	
11,10	2,42	11,14	HC ins C7	898	901	0,117	C7H12	739	
11,55	2,57	11,59	HC ins C7	924	924	1,661	C7H10	747	
11,85	2,35	11,89	HC ins C8	751	797	0,019	C8H14	752	
12,00	2,61	12,04	HC ins C7	919	919	0,527	C7H10	755	
12,15	2,49	12,19	HC ins C7	931	947	0,044	C7H12	758	
12,30	2,66	12,34	1,3,5-heptatrieno*	910	910	0,385	C7H10	761	781
12,75	2,56	12,79	HC ins C7	869	877	0,047	C7H12	769	
13,20	2,74	13,25	HC ins C7	885	897	0,017	C7H10	777	
13,35	2,62	13,39	HC ins C7	867	882	0,026	C7H12	779	
17,55	3,18	17,60	HC ins C8	719	850	0,018	C8H10	849	
18,00	3,29	18,05	HC ins C8	791	799	0,081	C8H16	856	
27,45	3,63	27,51	HC ins C10	681	718	0,141	C10H20	989	
28,95	3,67	29,01	HC ins C10	646	672	0,183	C10H20	1009	

8,10	2,24	8,14	ciclohexadieno	944	948	0,389	C6H8	687	
8,40	2,20	8,44	C1 ciclopenteno	935	935	0,700	C6H10	692	
9,30	2,34	9,34	ciclohexeno	939	946	0,187	C6H10	707	
9,90	2,40	9,94	C1 ciclohexadieno	830	912	0,086	C7H10	718	
10,50	2,47	10,54	C2 ciclopentadieno	823	880	0,022	C7H10	728	
10,80	2,38	10,84	propenil ciclopropano	780	844	0,056	C6H10	734	
10,80	2,48	10,84	C1 ciclohexadieno	781	917	0,130	C7H10	734	
17,25	2,87	17,30	C2 ciclohexadieno	907	908	0,137	C8H12	844	
11,55	2,75	11,60	cicloheptatrieno	884	899	0,020	C7H8	747	
12,15	2,83	12,20	1,3,5-cicloheptatrieno*	855	881	0,020	C7H8	758	765
28,50	3,44	28,56	HC ins C10	572	595	0,900	C10H14	1003	
34,35	4,89	34,43	C1 isopropil ciclohexeno	739	775	0,151	C10H18	1081	
Hidrocarbonetos insaturados				34 picos	8,140			0,834	
8,55	2,63	8,59	dihidro furano	933	968	0,169	C4H6O	694	
9,00	2,43	9,04	2-metil tetrahidro, furano*	817	839	0,016	C5H10O	701	682
11,25	2,61	11,29	C2 tetrahidro furano	786	834	0,028	C6H12O	742	
28,05	4,24	28,12	C6 tetrahidro furano	587	661	0,191	C10H20O	997	
49,65	5,27	49,74	2-metil 2,3-dihidro, benzofurano*	745	793	0,095	C9H10O	1295	1306
50,55	5,33	50,64	2-metil 2,3-dihidro, benzofurano*	807	807	0,299	C9H10O	1308	1306
52,35	5,39	52,44	C1 dihidro benzofurano	821	821	0,092	C9H10O	1336	
52,65	5,43	52,74	C1 dihidro benzofurano	814	820	0,261	C9H10O	1341	
10,20	2,53	10,24	2,5-dimetil, furano*	957	964	0,347	C6H8O	723	728
11,55	2,47	11,59	C2 furano	783	797	0,037	C6H8O	747	
13,95	2,82	14,00	2-propil, furano*	748	829	0,005	C7H10O	790	793
14,25	2,84	14,30	C2 furano	775	805	0,029	C7H10O	796	
14,70	2,87	14,75	2-etil 5-metil, furano*	782	830	0,056	C7H10O	803	802
15,30	2,94	15,35	2,3,5-trimetil, furano*	850	853	0,322	C7H10O	813	817
30,90	5,05	30,98	5-metil 2-acetil, furano*	807	902	0,101	C7H8O2	1035	1042
45,90	5,75	46,00	bifurano	819	831	0,179	C8H6O2	1242	
56,40	6,11	56,50	C1 hidroxil benzofurano	750	875	0,022	C9H8O2	1399	
9,15	2,65	9,19	metoxi buteno	787	787	0,051	C5H10O	704	
19,80	3,18	19,85	C5 oxirano	733	738	0,081	C7H14O	884	
25,65	3,87	25,71	metoxi buteno	775	801	0,252	C5H10O	965	
27,15	3,88	27,21	C1 oxirane butoxi	776	786	0,031	C7H14O2	985	
27,30	3,88	27,36	C1 oxirane propoxi	730	822	0,204	C4H8O	987	
31,80	4,23	31,87	C1 butoxi pentano	653	668	0,093	C10H22O	1047	
31,50	4,58	31,58	butiniloxi tetrahidro pirano	689	723	0,090	C9H14O2	1043	
51,15	6,06	51,25	dihidro benzopirano	785	791	0,098	C9H10O	1318	
21,15	3,49	21,21	C2 dioxolano	666	670	0,212	C8H14O2	905	
25,35	3,85	25,41	metoxi propanol	734	795	0,117	C4H8O	961	
Éteres				27 picos	3,476			1,241**	
26,70	4,49	26,77	Fenol*	959	963	6,287	C6H6O	979	981
32,25	4,65	32,33	2-metil, fenol*	938	939	0,898	C7H8O	1053	1052
33,75	4,72	33,83	3-metil, fenol*	900	900	4,911	C7H8O	1073	1070
33,75	4,75	33,83	4-metil, fenol*	866	869	3,313	C7H8O	1073	1077
38,40	4,72	38,48	2-etil, fenol*	777	791	0,046	C8H10O	1137	1137
40,50	4,88	40,58	4-etil, fenol*	923	937	10,670	C8H10O	1166	1163
41,40	4,99	41,48	2,3-dimetil, fenol*	895	895	0,061	C8H10O	1178	1181

42,45	5,02	42,53	3,4-dimetil, fenol*	935	935	0,258	C8H10O	1193	1195
45,60	4,86	45,68	2-etil 6-metil, fenol*	910	914	0,321	C9H12O	1237	*1236
46,65	5,08	46,73	p-alil, fenol*	894	907	0,245	C9H10O	1252	1254
46,95	4,83	47,03	4-propil, fenol*	932	932	0,570	C9H12O	1256	1260
47,10	4,87	47,18	3-metil 4-etil, fenol*	853	870	0,064	C9H12O	1259	1239
47,70	5,00	47,78	2,3,6-trimetil, fenol*	855	863	0,020	C9H12O	1267	1246
48,30	5,08	48,38	C3 fenol	866	874	0,066	C9H12O	1276	
49,20	5,29	49,29	propenil fenol	806	812	0,078	C9H10O	1289	
49,65	4,76	49,73	2-metil 5-isopropil, fenol*	756	820	0,023	C10H14O	1295	1304
50,85	4,79	50,93	4-(1-metil propil), fenol*	908	908	0,082	C10H14O	1313	1314
51,75	4,82	51,83	2-metil 6-propil, fenol*	859	877	0,014	C10H14O	1327	1320
53,85	4,85	53,93	C4 fenol	868	868	0,013	C10H14O	1359	
80,40	7,19	80,52	C1 fenil fenol	835	855	0,026	C13H12O	1821	
42,75	5,27	42,84	1,2-benzenodiol*	855	893	1,943	C6H6O2	1197	1200
45,00	5,65	45,09	benzenodiol	871	889	0,053	C6H6O2	1229	
47,10	5,43	47,19	3-metil, 1,2-benzenodiol*	914	918	0,049	C7H8O2	1259	1263
48,15	6,14	48,25	benzenodiol	755	837	0,274	C6H6O2	1274	
49,20	5,37	49,29	4-metil, 1,2-benzenodiol*	911	911	0,128	C7H8O2	1289	1294
52,05	5,63	52,14	C1 benzenodiol	829	858	0,104	C7H8O2	1332	
52,80	6,27	52,90	C1 benzenodiol	791	808	0,054	C7H8O2	1343	
55,35	5,49	55,44	4-etil catecol*	905	925	0,271	C8H10O2	1383	1392
45,15	5,62	45,24	isopropoxi fenol	893	893	0,317	C9H12O2	1231	
74,55	7,10	74,67	p-hidroxi bifeníl*	827	849	0,015	C12H10O	1710	1713
52,65	5,76	52,75	dihidro indenol*	950	951	0,469	C9H10O	1341	1335
52,20	6,06	52,30	indenol	859	861	0,111	C9H8O	1334	
53,55	6,20	53,65	indenol	901	904	1,115	C9H8O	1355	
60,30	6,14	60,40	dihidro naftalenol	827	896	0,155	C10H10O	1463	
85,95	8,38	86,09	2-hidroxi fluoreno*	866	872	0,031	C13H10O	1934	1941
Fenóis				35 picos	33,055			30,689**	
11,55	3,12	11,60	butenoato de vinila	960	960	0,303	C6H8O2	747	
13,05	2,75	13,10	C1 acetato de propila	901	901	0,017	C6H12O2	774	
28,20	4,15	28,27	terc butil pentanoato	655	828	0,105	C9H18O2	999	
28,50	4,00	28,57	2-metil 2-hidroxi butanoato de metila*	804	809	0,443	C6H12O3	1003	923
34,05	4,87	34,13	C1 metoxi butanoato	700	780	0,167	C6H10O3	1077	
36,60	5,63	36,69	C1 butenil hidroxi acetato	781	814	0,087	C7H12O3	1112	
43,50	5,20	43,59	etenil fenil acetato*	856	865	0,789	C10H10O2	1208	
44,10	5,27	44,19	etenil fenil acetato	868	878	1,700	C10H10O2	1216	
47,70	6,62	47,81	vinil fenil acetato	806	808	0,096	C10H10O2	1268	
48,60	6,87	48,71	vinil ciclohexanocarboxalato	624	661	0,152	C9H14O2	1280	
Ésteres				10 picos	3,860			0,443**	
7,95	2,15	7,99	ácido acético*	747	939	0,480	C2H4O2	685	665
9,45	2,53	9,49	ácido propanóico*	853	879	0,292	C3H6O2	709	700
13,35	2,82	13,40	ácido butanoico*	789	815	0,032	C4H8O2	780	789
18,45	4,19	18,52	ácido propanóico anidro	877	956	0,023	C6H10O3	863	
19,20	3,16	19,25	ácido pentanóico*	677	811	0,154	C5H10O2	875	879
23,85	3,66	23,91	ácido hexanóico	728	728	0,178	C5H11NO	941	
30,15	5,22	30,24	ácido octinóico	703	750	0,508	C8H12O2	1025	
31,80	3,85	31,86	ácido heptenóico	743	752	0,022	C7H12O2	1047	

40,65	3,63	40,71	ácido octanóico	701	744	0,009	C8H16O2	1168	
87,15	4,05	87,22	n-ácido hexadecanóico*	870	884	0,030	C16H32O2	1958	1958
11,55	2,52	11,59	ácido hexadienóico	676	699	1,092	C6H8O2	747	
26,25	3,39	26,31	C3 ácido propanodióico	850	854	0,014	C6H10O4	973	
12,90	2,06	12,93	metoxi ácido acético	916	916	0,019	C3H6O3	771	
30,00	4,20	30,07	C1 hidroxí ácido valérico	710	743	0,426	C6H12O3	1023	
30,30	4,12	30,37	C2 hidroxí ácido butanóico	745	777	0,050	C6H12O3	1027	
40,05	4,90	40,13	ácido benzoico*	901	902	0,250	C7H6O2	1160	1159
45,60	4,97	45,68	C1 ácido benzóico	806	878	0,036	C8H8O2	1237	
38,40	4,47	38,47	C1 ciclopentenil carboxilato	741	749	0,022	C7H10O2	1136	
Ácidos carboxílicos			18	3,638	1,238				
8,40	2,43	8,44	Pentanal*	788	803	0,063	C5H10O	692	696
8,85	2,52	8,89	pentenal	846	846	0,085	C5H8O	699	
9,45	2,68	9,49	2-pentenal (E)*	648	665	0,147	C5H8O	710	724
9,90	2,64	9,94	pentanal	803	822	0,022	C5H10O	718	
11,55	3,09	11,60	2-metil, 2-butenal (E)*	933	933	0,342	C5H8O	747	749
11,85	2,78	11,90	2-metil, pentanal*	862	879	0,010	C6H12O	753	746
12,15	3,18	12,20	pentenal	892	892	0,079	C5H8O	758	
12,75	2,91	12,80	hexanal	587	644	0,724	C6H12O	769	
13,65	3,50	13,71	3-metil, 2-butenal*	929	932	0,065	C5H8O	785	783
16,35	3,37	16,41	2-metil, 2-pentana* ^l	826	826	0,034	C6H10O	830	830
17,70	3,58	17,76	2-hexenal*	861	864	0,020	C6H10O	851	850
20,55	3,57	20,61	heptenal	793	813	0,156	C7H12O	896	
29,55	4,12	29,62	octanal	667	693	0,138	C8H16O	1017	
12,00	3,50	12,06	hidroxí butanal	942	942	0,073	C4H8O2	756	
13,65	4,52	13,73	butanodial	888	907	0,006	C4H6O2	785	
15,30	4,07	15,37	3-furaldeído*	890	890	0,013	C5H4O2	813	815
16,50	4,34	16,57	Furfural*	943	943	0,135	C5H4O2	832	834
25,35	5,07	25,43	5-metil, 2-furanocarboxaldeído*	733	788	0,050	C6H6O2	961	965
39,15	6,79	39,26	furanyl propenal	831	831	0,128	C7H6O2	1147	
25,20	5,02	25,28	Benzaldeído*	924	927	0,133	C7H6O	959	968
31,50	5,32	31,59	Benzenoacetaldeído*	923	928	0,053	C8H8O	1043	1042
33,30	5,16	33,39	3-metil, benzaldeído*	781	862	0,009	C8H8O	1067	1059
39,15	5,28	39,24	C1 benzenoacetaldeído	855	886	0,067	C9H10O	1147	
40,35	5,59	40,44	Benzenopropanal*	897	901	0,063	C9H10O	1164	1178
48,00	6,13	48,10	3-fenil, propenal*	839	850	0,073	C9H8O	1272	1273
50,10	5,82	50,20	benzilidenomalonaldeído	873	878	0,065	C10H8O2	1302	
51,00	5,05	51,08	C3 benzaldeído	786	810	0,029	C10H12O	1315	
53,85	6,50	53,96	C1 benzenodicarboxaldeído	757	773	0,331	C9H8O2	1360	
40,50	5,56	40,59	dihidroxí benzaldeído	752	806	0,023	C7H6O3	1166	
50,25	6,13	50,35	hidroxí benzaldeído	895	895	0,110	C7H6O2	1304	
50,70	5,99	50,80	hidroxí benzaldeído	773	852	0,039	C7H6O2	1311	
54,00	6,41	54,11	hidroxí benzaldeído	951	954	0,831	C7H6O2	1362	
56,25	5,76	56,35	hidroxí benzaldeído	706	868	0,036	C7H6O2	1397	
56,55	6,82	56,66	hidroxí metoxi benzaldeído	934	934	0,124	C8H8O3	1402	
58,35	6,54	58,46	C1 hidroxí benzaldeído	879	879	0,202	C8H8O2	1431	
33,60	4,93	33,68	oxononanal	725	736	0,111	C9H16O2	1071	
Aldeídos			36 picos	4,589	1,211**				
8,55	2,46	8,59	2-pentanona	836	836	0,144	C5H10O	694	

9,45	2,61	9,49	2-pentanona*	875	935	0,563	C5H10O	710	686
11,40	2,74	11,45	Hexanona*	816	816	0,010	C6H12O	745	738
10,80	2,45	10,84	hexanona	712	712	0,156	C7H12O	734	
12,00	2,81	12,05	2-metil, 3-pentanona*	868	884	0,006	C6H12O	755	748
13,65	2,98	13,70	3-hexanona*	940	940	0,048	C6H12O	785	784
13,80	3,05	13,85	2-hexanona*	945	945	0,090	C6H12O	788	788
17,25	3,15	17,30	3-etil, 2-pentanona*	758	818	0,061	C7H14O	844	838
17,25	3,18	17,30	4-metil, 2-hexanona	876	876	0,073	C7H14O	844	846
19,80	3,35	19,86	3-Heptanone*	891	922	0,069	C7H14O	884	885
20,10	3,40	20,16	2-heptanona*	908	908	0,097	C7H14O	889	889
27,75	4,32	27,82	heptanona	706	752	0,173	C7H14O	993	
28,95	5,14	29,04	octanona	748	857	0,259	C8H16O	1009	
29,85	5,25	29,94	octanona	658	721	0,195	C8H16O	1021	
33,30	5,34	33,39	octanona	644	780	0,546	C8H16O	1067	
33,60	4,35	33,67	octanona	775	792	0,060	C8H16O	1071	
9,00	2,57	9,04	pentenona	913	937	0,092	C5H8O	701	
10,20	2,49	10,24	hexenona	727	852	0,241	C6H10O	723	
12,90	2,98	12,95	hexenona	825	863	0,183	C6H10O	771	
14,40	3,24	14,45	4-metil, penten-2-ona*	869	872	0,009	C6H10O	798	798
15,90	2,98	15,95	heptenona	664	715	0,107	C7H12O	822	
16,95	3,57	17,01	3-hexen-2-ona*	925	925	0,176	C6H10O	839	834
17,85	3,29	17,90	heptenona	770	770	0,028	C7H12O	853	
18,00	2,94	18,05	octeneno	754	781	0,017	C8H14O	856	
22,35	3,69	22,41	heptanona	832	832	0,055	C7H12O	921	
23,10	3,75	23,16	octenona	956	956	0,072	C7H12O	931	
23,40	3,83	23,46	heptenona	819	819	0,195	C7H12O	935	
24,15	4,13	24,22	heptinona	722	759	0,039	C7H10O	945	
25,20	4,06	25,27	heptenona	709	710	0,062	C7H12O	959	
31,35	4,68	31,43	6-metil, 2,5 heptadien-2-ona*	840	847	0,049	C8H12O	1041	1023
35,55	4,88	35,63	decenona	743	744	0,151	C7H12O	1097	
9,60	2,66	9,64	2,3-pentanodiona*	801	835	0,372	C5H8O2	712	700
19,05	3,47	19,11	hexenodiona	707	838	0,021	C6H8O2	872	
22,80	5,03	22,88	2,5-hexanodiona*	899	902	0,090	C6H10O2	927	920
25,05	5,20	25,14	hexenodiona	809	842	0,016	C6H8O2	957	
28,95	4,22	29,02	C1 propenil pentanodiona	653	694	0,111	C9H14O2	1009	
31,80	5,37	31,89	acetil heptanodiona	777	779	0,114	C8H16O	1047	
42,75	5,54	42,84	nonadiona	695	772	0,028	C9H16O2	1197	
9,15	2,85	9,20	hidroxi propanona	853	971	0,010	C3H6O2	704	
10,35	2,98	10,40	3-hidroxi, 2-butanona*	902	912	0,011	C4H8O2	726	720
15,75	3,76	15,81	4-hidroxi, 2-pentanona*	850	855	0,026	C5H10O2	820	818
16,95	3,62	17,01	4-metil 4-hidroxi, 2-pentanona*	881	887	0,225	C6H12O2	839	841
28,65	2,25	28,69	hidroxi octanona	787	811	0,029	C8H16O2	1005	
30,15	5,19	30,24	C3 hidroxi hexanona	749	763	0,552	C9H18O2	1025	
35,55	5,11	35,64	hidroxi decanona	742	812	0,040	C10H20O2	1097	
19,80	5,07	19,88	2-ciclopenteno-1,4-diona*	792	792	0,080	C5H4O2	885	884
30,15	5,11	30,24	3-metil, 1,2-ciclopentanodiona*	917	918	0,291	C6H8O2	1025	1043
30,30	5,72	30,40	2-ciclohexeno-1,4-diona	874	897	0,032	C6H6O2	1027	1032
33,15	5,43	33,24	C2 ciclopentenodiona	745	745	0,636	C8H14O	1065	
21,30	4,64	21,38	2-metil, 2-ciclopenten-1-ona*	890	890	0,055	C6H8O	907	910

23,10	5,12	23,19	2-ciclohexen-1-ona*	869	869	0,030	C6H8O	931	939
24,15	4,35	24,22	C2 ciclopentenona	768	768	0,066	C7H10O	945	
25,65	5,29	25,74	3-metil, 2-ciclopenten-1-ona*	925	925	0,341	C6H8O	965	969
29,70	5,16	29,79	C2 ciclopentenona	895	901	0,640	C7H10O	1019	
27,60	4,86	27,68	C2 ciclopentenona	864	864	0,256	C7H10O	991	
31,05	5,16	31,14	2,3-dimetil, ciclopentenona*	893	893	1,817	C7H10O	1037	1040
29,25	5,41	29,34	C1 etenil ciclopentanona	787	788	0,031	C8H12O	1013	
33,00	4,65	33,08	2,3,4-trimetil, 2-ciclopenten-1-ona*	774	789	0,121	C8H12O	1063	1071
26,40	5,97	26,50	C1 ciclohexenona	671	671	0,073	C7H10O	975	
32,40	5,46	32,49	C1 ciclohexenona	943	944	0,212	C7H10O	1055	
39,00	6,08	39,10	C1 ciclohexenona	643	721	0,029	C7H10O	1145	
34,20	5,85	34,30	etenil ciclohexanona	698	703	0,368	C8H12O	1079	
38,10	5,07	38,18	etenil ciclohexanona	711	848	0,092	C8H12O	1132	
34,95	4,90	35,03	C3 ciclopentenona	849	862	0,106	C8H12O	1089	
31,95	4,87	32,03	C1 ciclopentenil etanona	780	825	0,115	C8H12O	1049	
32,40	5,16	32,49	C2 hidroxil ciclopentenona	695	862	0,064	C7H10O2	1055	
33,60	5,59	33,69	C1 hidroxil ciclohexanona	746	748	0,113	C7H12O2	1071	
33,90	5,43	33,99	3-etil, 2-ciclopenten-1-ona*	821	863	0,380	C7H10O	1075	1082
35,70	4,89	35,78	hidroxil ciclopentil etanona	723	756	0,257	C7H12O2	1099	
37,05	5,04	37,13	C2 hidroxil ciclopentenona	884	886	0,048	C7H10O2	1118	
38,25	6,20	38,35	C2 hidroxil ciclopentenona	732	732	0,211	C7H10O2	1135	
43,80	6,27	43,90	C2 hidroxil ciclopentenona	796	802	0,457	C7H10O2	1212	
43,95	7,20	44,07	hidroxil cicloheptatrienona	730	753	0,035	C7H6O2	1214	
23,70	5,93	23,80	5-metil, 2(5H)-furanona*	891	891	0,029	C5H6O2	939	938
27,00	4,96	27,08	C1 furanodiona	655	743	0,118	C5H4O3	983	
28,95	4,97	29,03	C3 furanona	823	826	0,215	C7H10O2	1009	
30,90	5,83	31,00	C2 furanodiona	833	840	0,103	C6H6O3	1035	
31,50	7,00	31,62	4-metil, 5H-furan-2-ona*	916	916	0,119	C5H6O2	1044	1052
35,40	5,89	35,50	C3 furanona	824	826	0,029	C7H10O2	1095	
40,50	6,28	40,60	C2 propenil furanona	686	712	0,066	C9H12O2	1166	
40,80	4,88	40,88	5-metil 2-furanil, 2-butanona*	885	885	0,304	C9H12O2	1170	1160
57,75	6,09	57,85	C1 hidroxil furanona	734	735	0,303	C10H8O3	1421	
37,50	7,65	37,63	acetil dihidro furanona	895	895	0,006	C6H8O3	1125	
50,40	5,92	50,50	benzofuranona	788	793	0,040	C8H6O2	1306	
50,85	6,16	50,95	benzofuranona	777	780	0,500	C8H6O2	1313	
53,25	7,86	53,38	isobenzofuranona	912	912	0,056	C8H6O2	1351	
69,60	7,94	69,73	C1 benzofuranona	851	869	0,135	C10H12O	1619	
29,25	4,51	29,33	C3 dihidro furanona	715	761	0,072	C7H12O2	1013	
34,05	4,43	34,12	C2 dihidro furanona	702	764	0,091	C7H16O	1077	
34,05	6,45	34,16	C2 dihidro furanona	787	787	0,057	C6H8O2	1077	
26,10	6,35	26,21	2H-piran-2-ona*	884	887	0,033	C5H4O2	971	973
37,35	4,91	37,43	C2 tetrahidro piranona	734	831	0,037	C7H16O	1122	
43,05	6,52	43,16	C2 piranona	825	828	0,047	C7H8O2	1202	
56,40	7,50	56,53	4H-1-benzopiran-4-ona*	814	829	0,048	C9H6O2	1400	1392
56,85	7,42	56,97	benzopiranona	801	846	0,026	C9H6O2	1407	
59,25	7,78	59,38	2H-1-benzopiran-2-ona*	883	883	0,098	C9H6O2	1446	1432
63,30	7,13	63,42	C1 benzopiranona	832	862	0,026	C10H8O2	1512	
66,60	7,52	66,73	C1 benzopiranona	892	892	0,041	C10H8O2	1567	

36,60	5,76	36,70	2-metil 3-hidroxi, 4-pirona*	861	871	0,032	C6H6O3	1112	1114
27,75	4,05	27,82	hidroxi ciclopentil etanona	709	723	0,079	C7H12O2	993	
48,75	6,70	48,86	dihidro indenona	961	969	1,775	C9H8O	1282	
50,55	6,07	50,65	C1 dihidro indenona	832	875	0,174	C10H10O	1309	
51,30	6,21	51,40	C1 indanona	889	889	0,088	C10H10O	1320	
56,25	6,49	56,36	C1 indanona	822	829	0,145	C10H10O	1397	
57,15	6,59	57,26	C1 indanona	836	854	0,111	C10H10O	1412	
57,45	6,72	57,56	C1 indanona	807	814	0,082	C10H10O	1416	
58,65	6,03	58,75	C2 dihidro indenona	756	764	0,028	C11H12O	1436	
70,80	7,32	70,92	C1 hidroxi dihidro indenona	741	759	0,060	C10H10O2	1641	
29,10	5,64	29,19	C1 benzoquinona	826	829	0,039	C7H6O2	1011	
37,80	5,43	37,89	1-fenil, 2-propanona*	912	912	0,047	C9H10O	1128	1110
42,30	6,05	42,40	naftalenodiona	883	886	0,015	C10H6O2	1191	
42,60	5,87	42,70	tetrahidro pentalenona (iso)	733	733	0,028	C8H10O	1195	
45,30	5,35	45,39	C1 fenil acetona	846	846	0,065	C10H12O	1233	
46,20	5,47	46,29	4-fenil, 2-butanona	876	883	0,025	C10H12O	1246	
48,45	5,67	48,54	dihidro acetofenona	828	846	0,069	C8H8O3	1278	
55,20	5,49	55,29	dihidroxi fenil propanona	708	724	0,007	C9H10O3	1380	
55,20	6,70	55,31	dihidro naftalenona	737	771	0,020	C10H10O	1381	
56,70	7,11	56,82	C1 hidroxi octahidro naftalenona	760	760	0,098	C11H18O2	1404	
61,35	6,56	61,46	C1 fenil pentenona	811	814	0,035	C12H14O	1480	
78,30	7,79	78,43	benzil pentanodiona	622	640	0,027	C12H14O2	1780	
33,15	5,34	33,24	Acetofenona*	913	913	0,095	C8H8O	1065	1075
41,25	5,25	41,34	3-metil, acetofenona*	751	847	0,042	C9H10O	1176	1183
56,25	6,41	56,36	hidroxi acetofenona	910	910	0,078	C8H8O2	1397	
58,80	6,10	58,90	1-(2-Vinylphenyl)ethanone	816	823	0,088	C10H10O	1438	
59,10	6,66	59,21	4-hidroxi, acetofenona*	725	725	0,069	C8H8O2	1443	1442
62,10	6,73	62,21	4-hidroxi 3-metoxi acetofenona*	823	845	0,037	C9H10O3	1492	1491
63,45	6,64	63,56	C1 hidroxi acetofenona	864	869	0,066	C9H10O2	1514	
27,15	4,89	27,23	4-acetiloxi, 2-butanona*	806	844	0,132	C6H10O3	985	985
Cetonas				128 picos	18,885			6,235**	
32,25	4,00	32,32	nitrogenado	753	832	0,071	C10H15NO	1053	
20,55	3,45	20,61	hexanoamida	711	721	0,319	C4H10O2	896	
Compostos nitrogenados				2 picos	0,390			0,000**	
7,80	2,45	7,84	butanol	868	868	0,005	C4H10O	683	
9,75	2,50	9,79	2-pentanol*	766	813	0,033	C6H13NO2	715	706
14,40	2,85	14,45	2-hexanol ®*	731	853	0,119	C6H14O	798	801
16,20	2,91	16,25	2-metil, 2-hexanol*	943	943	1,079	C7H16O	827	822
16,80	2,97	16,85	heptanol	927	927	1,194	C7H16O	837	
18,45	3,01	18,50	heptanol	828	859	0,109	C7H16O	863	
19,05	3,07	19,10	heptanol	801	823	0,197	C7H16O	872	
19,65	3,10	19,70	heptanol	823	841	0,025	C7H16O	882	
20,10	3,10	20,15	heptanol	898	898	0,021	C7H16O	889	
20,55	3,14	20,60	3-heptanol*	939	939	0,092	C7H16O	896	892
20,85	3,15	20,90	2-heptanol*	908	908	0,206	C7H16O	901	896
22,95	3,10	23,00	octenol	862	879	0,012	C8H18O	929	
27,60	4,26	27,67	nonanol	635	688	0,602	C9H20O	991	
28,50	3,53	28,56	octanol	676	758	0,144	C8H18O	1003	

28,65	4,06	28,72	octanol	695	826	0,994	C8H18O	1005	
28,65	5,46	28,74	octanol	765	798	0,028	C8H18O	1005	
28,95	3,45	29,01	octanol	744	831	0,678	C8H18O	1009	
30,60	4,31	30,67	octanol	654	767	0,761	C8H18O	1031	
32,70	4,11	32,77	octanol	713	776	0,140	C5H12O	1059	
33,00	4,09	33,07	nonanol	648	711	0,095	C9H20O	1063	
33,00	4,12	33,07	nonanol	693	783	0,085	C9H20O	1063	
33,45	4,59	33,53	3-nonanol*	652	682	0,066	C9H20O	1069	1069
33,90	4,13	33,97	nonanol	767	776	0,037	C9H20O	1075	
34,50	4,82	34,58	nonanol	659	661	0,113	C9H20O	1083	
14,40	3,10	14,45	hexadienol	877	946	0,011	C6H10O	798	
15,00	2,87	15,05	heptenol	917	917	0,063	C7H14O	808	
15,60	2,93	15,65	heptenol	803	850	0,271	C7H14O	818	
18,90	3,11	18,95	heptenol	806	810	0,032	C7H14O	870	
19,35	3,19	19,40	heptenol	745	771	0,096	C7H14O	877	
20,40	3,24	20,45	heptenol	807	809	0,245	C7H14O	894	
20,55	3,26	20,60	heptenol	842	847	0,248	C7H14O	896	
21,00	3,28	21,05	heptenol	805	822	0,098	C7H14O	903	
22,50	3,71	22,56	heptadienol	762	795	0,171	C7H12O	923	
22,65	3,37	22,71	octenol	775	778	0,062	C8H16O	925	
24,60	3,75	24,66	octenol	740	754	0,076	C8H16O	951	
24,60	4,16	24,67	octenol	714	721	0,086	C8H16O	951	
24,75	3,54	24,81	octenol	751	766	0,104	C8H16O	953	
24,90	4,18	24,97	hepteninol	796	830	0,220	C7H10O	955	
25,05	4,25	25,12	octenol	662	736	0,134	C8H16O	957	
25,65	3,63	25,71	octenol	740	767	0,195	C8H16O	965	
25,80	4,82	25,88	octenol	704	716	0,031	C8H16O	967	
27,75	3,59	27,81	heptenol	694	765	0,079	C7H14O	993	
28,05	4,14	28,12	1-octen-3-ol*	681	715	0,040	C8H16O	997	986
28,95	4,10	29,02	heptenal	746	834	0,293	C7H14O	1009	
29,25	4,48	29,32	heptenol	655	690	0,132	C7H14O	1013	
29,55	3,70	29,61	octenol	704	743	0,214	C8H16O	1017	
29,70	3,91	29,77	octenol	715	797	0,066	C8H16O	1019	
31,50	4,86	31,58	octenol	748	750	0,224	C8H16O	1043	
31,95	4,29	32,02	nonenol	729	734	0,055	C9H18O	1049	
32,55	4,46	32,62	nonenol	741	788	0,125	C9H18O	1057	
34,65	4,53	34,73	3-decin-2-ol*	638	668	0,387	C10H18O	1085	1101
8,55	2,36	8,59	propanodiol	850	977	0,029	C3H8O2	694	
15,60	2,90	15,65	hexinodiol	662	712	0,342	C6H10O2	818	
24,90	3,95	24,97	heptanodiol	817	831	0,111	C7H16O2	955	
24,90	4,01	24,97	octadienodiol	761	813	0,065	C8H14O2	955	
24,90	3,76	24,96	octanodiol	698	705	0,233	C8H18O2	955	
25,35	3,89	25,41	octanodiol	721	736	0,107	C8H18O2	961	
25,35	4,39	25,42	octadienodiol	704	712	0,396	C8H14O2	961	
25,80	3,95	25,87	octanodiol	735	756	1,016	C8H18O2	967	
26,25	4,13	26,32	heptadienodiol	737	808	0,130	C7H12O2	973	
28,50	4,50	28,58	octadienodiol	708	714	0,277	C8H14O2	1003	
31,50	3,80	31,56	octanodiol	693	746	0,036	C8H18O2	1043	
31,05	4,56	31,13	nonadienodiol	666	722	0,272	C9H16O2	1037	

32,40	4,13	32,47	octanodiol	881	881	0,122	C8H18O2	1055	
33,00	4,29	33,07	nonanodiol	809	843	0,361	C9H16O2	1063	
39,75	5,39	39,84	octinodiol	710	734	0,095	C8H14O2	1155	
44,55	5,10	44,64	decanodiol	676	705	0,201	C10H22O2	1223	
16,20	2,99	16,25	C2 ciclopentanol	704	757	0,306	C7H14O	827	
18,00	3,23	18,05	C2 ciclopentanol	777	819	0,091	C7H14O	856	
19,35	3,40	19,41	C2 ciclopentanol	906	944	0,136	C7H14O	877	
20,10	3,23	20,15	C2 ciclopentanol	803	806	0,553	C7H14O	889	
19,80	3,72	19,86	Ciclohexenol*	732	823	0,020	C6H12O	884	886
20,40	3,60	20,46	C1 ciclohexanol	836	836	0,245	C7H14O	894	
20,85	3,57	20,91	C1 ciclohexenol	828	833	0,252	C7H12O	901	
22,80	3,39	22,86	4-metil, ciclohexanol (trans)*	737	741	0,047	C7H14O	927	926
23,85	3,80	23,91	C1 ciclohexanol	757	772	0,128	C7H14O	941	
24,90	3,88	24,96	C1 ciclohexenol	702	732	0,185	C7H12O	955	
26,55	4,18	26,62	C1 ciclohexenol	863	863	0,031	C7H12O	977	
32,55	4,97	32,63	C2 ciclohexanol	692	702	0,102	C8H16O	1057	
33,60	3,96	33,67	C2 ciclohexanol	687	687	0,148	C8H16O	1071	
37,50	4,46	37,57	alil ciclohexanol	683	698	0,072	C9H16O	1124	
40,95	5,44	41,04	C1 cicloheptanol	673	686	0,188	C8H16O	1172	
43,35	5,49	43,44	C1 cicloheptanol	621	741	0,100	C8H16O	1206	
42,30	5,86	42,40	C1 cicloheptanol	662	698	0,081	C8H16O	1191	
27,90	4,50	27,98	C1 ciclohexanodiol	740	750	0,329	C7H14O2	995	
27,60	3,88	27,66	metoxi butanol	891	899	0,390	C5H12O2	991	
33,15	3,38	33,21	C3 dioxanol	723	732	0,030	C7H14O3	1065	
35,55	4,47	35,62	dihidroxi heptano	890	926	0,241	C7H16O2	1097	
35,70	4,64	35,78	C1 hidroxi propanodiol	768	783	0,139	C4H10O2	1099	
30,75	5,12	30,84	benzil álcool*	916	917	0,635	C7H8O	1033	1041
31,05	5,09	31,13	fenil propanodiol	792	793	0,248	C9H12O2	1037	
45,00	5,90	45,10	C1 benzenometanol	730	757	0,053	C8H10O	1229	
60,90	6,16	61,00	tetrahidro naftalenol	788	805	0,019	C10H12O	1472	
63,90	6,99	64,02	2-naftalenol*	914	914	0,109	C10H8O	1522	1521
70,05	6,91	70,17	C1 naftalenol	761	803	0,037	C11H10O	1627	
71,10	7,16	71,22	C1 naftalenol	773	790	0,042	C11H10O	1647	
78,60	8,36	78,74	fenil hexanol	682	712	0,298	C12H18O	1786	
Álcoois				97 picos	19,637			2,833**	
27,15	4,85	27,23	digitoxose	631	662	0,081	C6H12O4	985	
35,25	4,75	35,33	Derivado de açúcar	703	767	0,071	C6H10O3	1093	
43,50	6,93	43,62	Derivado de açúcar	784	786	0,021	C6H8O4	1208	
48,60	6,07	48,70	Derivado de açúcar	680	754	0,082	C11H14O7	1280	
49,80	6,03	49,90	Derivado de açúcar	700	728	0,023	C9H14O7	1297	
Açúcares				5 picos	0,277			0,000**	
Totais				409 picos	100,00			46,170	

(¹⁺²t_r)^a: soma do tempo de retenção nas duas dimensões em minutos (soma do tempo da ¹D com o tempo da ²D); S^b: similaridade da biblioteca; R^c: similaridade modo reversa da biblioteca; A^d: área percentual calculada; LTPRI^e: índice retenção: IR_{calc.}=índice de retenção calculado para cada composto, IR_{lit.}= índice de retenção teórico referente à literatura (NIST).

* Identificação confirmada pelo LTPRI. A identificação dos demais compostos foi somente por comparação com os espectros da biblioteca do GCxGC/TOFMS (biblioteca Nist) e análise detalhada de cada espectro, não especificando as posições das ramificações e insaturações.;

**Soma das áreas percentuais dos compostos positivamente pelo LTPRI

Tabela 9: Identificação dos compostos da fase aquosa do bio-óleo bruto não catalítico do bagaço da cana-de-açúcar (FA BC) por GCxGC/TOFMS.

¹ t _R (min)	² t _R (s)	¹⁺² t _R (min) ^a	Nome	S ^b	R ^c	A (%) ^d	Fórmula	LTPRI ^e	
								IR _{Cal.}	IR _{Lit.}
12,85	2,93	12,90	Tolueno*	947	947	2,150	C7H8	771	769
18,25	3,35	18,31	etil benzeno*	949	950	0,388	C8H10	860	865
18,85	3,33	18,91	o-xileno*	885	885	0,010	C8H10	869	863
30,10	3,65	30,16	1-isopropil 2-metil, benzeno*	912	912	0,028	C10H14	1024	1021
31,60	4,71	31,68	1-propinil, benzeno*	802	865	0,012	C9H8	1044	1058
60,85	6,40	60,96	tetradecahidro fenantreno	589	589	0,194	C14H24	1472	
			Hidrocarbonetos aromáticos	6 picos		2,782		2,587**	
10,75	2,33	10,79	metil, ciclohexano*	838	867	0,042	C7H14	733	736
			Hidrocarboneto saturados	1 pico		0,042		0,042**	
11,95	3,33	12,01	HC ins	761	956	0,033	C4H6	755	
43,60	7,43	43,72	dodeceno	733	799	0,039	C12H24	1210	
			Hidrocarbonetos insaturados	2 picos		0,071		0,000**	
10,15	2,49	10,19	2,5-dimetil, furano*	560	898	0,002	C6H8O	722	728
19,60	4,53	19,68	vinil furano	785	785	0,055	C6H6O	881	
34,30	5,68	34,39	2-(hidroxi acetil) furano	865	865	0,156	C6H6O3	1081	
45,85	5,76	45,95	bifurano	682	764	0,013	C8H6O2	1241	
43,45	5,21	43,54	2,3-dihidro, benzofurano*	811	814	0,119	C8H8O	1207	1223
27,40	5,11	27,49	metoxi dioxolano	777	785	0,019	C4H8O3	989	
28,30	4,79	28,38	benzodioxole	557	776	0,015	C7H6O2	1000	
86,20	7,41	86,32	metoxi formil benzoxodiole	704	756	0,055	C9H8O4	1939	
86,65	8,01	86,78	metoxi formil benzoxodiole	721	753	0,137	C9H8O4	1949	
43,30	4,90	43,38	C3 metoxi benzeno	768	818	0,031	C10H14O	1205	
62,50	6,67	62,61	etoxi benzeno	727	787	0,344	C8H10O	1499	
63,70	6,65	63,81	C1 pentenil metoxi benzeno	790	831	0,159	C13H18O	1519	
35,95	5,37	36,04	dibutoxi metano	784	804	0,111	C9H20O2	1103	
43,30	7,23	43,42	propeniloxi propeno	686	728	0,234	C6H10O	1205	
39,10	5,85	39,20	C1 terc-butoxi ciclohexeno	616	669	0,695	C11H20O	1147	
			Éteres	15 picos		2,145		0,121**	
26,65	4,48	26,72	Fenol*	964	964	4,182	C6H6O	978	977
32,20	4,66	32,28	2-metil, fenol*	946	950	1,536	C7H8O	1052	1052
33,70	4,70	33,78	4-metil, fenol*	950	950	3,302	C7H8O	1072	1076
35,50	4,34	35,57	3-metil, fenol*	528	793	0,022	C7H8O	1096	1084
38,35	4,73	38,43	2-etil, fenol*	892	892	0,121	C8H10O	1136	1136
39,10	4,80	39,18	2,4-dimetil, fenol*	942	942	1,203	C8H10O	1146	1149
40,45	4,82	40,53	4-etil, fenol*	957	961	0,716	C8H10O	1165	1166
42,40	5,03	42,48	3,4-dimetil, fenol*	900	905	0,082	C8H10O	1192	1193
45,55	4,87	45,63	4-etil, 3-metil, fenol*	909	921	0,312	C9H12O	1237	1239
46,90	4,83	46,98	4-propil, fenol*	917	917	0,040	C9H12O	1256	1260
47,65	5,00	47,73	2,3,6-trimetil, fenol*	904	904	0,025	C9H12O	1266	1246
46,60	5,10	46,69	p-alil, fenol	828	871	0,022	C9H10O	1252	1254
51,40	5,15	51,49	C1 alil fenol	791	834	0,107	C10H12O	1322	
34,90	5,11	34,99	2-metoxi, fenol*	926	927	0,113	C7H8O2	1089	1089
42,55	5,06	42,63	5-metil 2-metoxi, fenol*	917	925	0,031	C8H10O2	1194	1202
48,70	4,98	48,78	4-etil 2-metoxi, fenol*	622	838	0,018	C9H12O2	1281	1285
44,05	5,73	44,15	4-metoxi, fenol*	889	891	0,144	C7H8O2	1216	1235

45,10	5,62	45,19	isoproxi fenol	861	863	0,251	C9H12O2	1230	
54,25	6,56	54,36	dimetoxi fenol	654	655	0,093	C8H10O3	1366	
57,40	6,55	57,51	etoxi propenil fenol	533	805	0,062	C8H8O3	1416	
54,25	6,37	54,36	C2 hidroxí fenol	686	722	0,017	C8H10O2	1366	
42,70	5,49	42,79	1,2-benzenodiol (catecol)*	944	944	18,122	C6H6O2	1196	1200
47,95	6,21	48,05	benzenodiol	870	883	0,275	C6H6O2	1271	
47,05	5,45	47,14	3-metil, 1,2-benzenodiol*	961	961	1,003	C7H8O2	1258	1263
49,15	5,41	49,24	4-metil, 1,2-benzenodiol*	962	962	2,919	C7H8O2	1288	1294
52,00	5,62	52,09	C1 benzenodiol	745	802	0,031	C7H8O2	1331	
52,75	6,29	52,85	C1 benzenodiol	874	876	0,136	C7H8O2	1343	
53,20	6,91	53,32	C1 benzenodiol	779	785	0,258	C7H8O2	1350	
52,60	5,44	52,69	C2 benzenodiol	839	839	0,125	C8H10O2	1340	
55,30	5,53	55,39	4-etil, 1,2-benzenodiol (etil catecol)*	934	934	1,928	C8H10O2	1382	1392
56,95	5,69	57,04	C2 benzenodiol	845	851	0,254	C8H10O2	1408	
58,00	6,28	58,10	C2 benzenodiol	768	857	0,047	C8H10O2	1425	
61,15	5,48	61,24	C3 benzenodiol	818	821	0,198	C9H12O2	1476	
58,30	7,70	58,43	metoxi benzenodiol	699	707	0,052	C7H8O3	1431	
52,60	5,77	52,70	2,3-dihidro, 1H-indenol*	888	895	0,069	C9H10O	1340	1335
53,65	6,16	53,75	indenol	746	857	0,022	C9H8O	1357	
57,85	5,69	57,94	C1 indanol	837	915	0,027	C10H12O	1423	
Fenóis				37 picos	37,864			35,908*	
								*	
22,60	3,33	22,66	hexanoato de metila*	739	859	0,002	C7H14O2	924	925
40,45	5,96	40,55	oxopentanoato de dimetila	755	814	0,034	C7H10O5	1165	
44,95	7,16	45,07	C2 ciclopropanocarboxilato de hexila	721	736	0,136	C12H22O2	1229	
48,70	6,98	48,82	ciclopentanoato de etenila	697	703	6,289	C9H14O2	1282	
49,15	6,70	49,26	ciclohexanocarboxilato de etenila	702	718	0,020	C9H14O2	1288	
50,95	7,48	51,07	ciclohexanocarboxilato de etenila	709	723	7,445	C9H14O2	1315	
55,00	6,59	55,11	C4 ciclohexanoperóxocarboxilato	702	906	0,883	C11H20O3	1378	
54,55	6,71	54,66	hidroxí benzenoacético de metila	772	802	0,032	C9H10O3	1371	
59,20	5,42	59,29	C1 fenilato de ciclopentil bi(metil, propil), 1,2-	670	729	0,066	C13H16O2	1445	
82,90	5,54	82,99	benzenodicarboxilato*	904	905	0,175	C16H22O4	1870	1871
85,30	5,66	85,39	2-metil, 1,2-benzocarboxilato de butila*	873	873	0,012	C16H22O4	1920	1900
112,0		112,0							
0	5,47	9	1,2-benzenodicarboxilato diisooctila* oxotetrahidro furanocarboxilato de etila	844	850	0,020	C24H38O4	2553	2532
42,25	7,87	42,38	etila	614	928	0,010	C7H10O4	1191	
48,70	7,21	48,82	acetiloxi butenil acetato	666	734	0,017	C8H12O4	1282	
Ésteres				14 picos	15,141			0,209**	
36,70	6,50	36,81	ácido hexenóico	711	728	0,065	C6H10O2	1113	
36,70	6,56	36,81	ácido hexenóico	678	678	0,129	C6H10O2	1113	
57,10	6,68	57,21	ácido nonanóico	630	731	1,740	C9H18O2	1411	
87,10	4,06	87,17	n-ácido tetradecanóico*	714	792	0,016	C16H32O2	1957	1966
53,20	6,30	53,31	ácido octadienodióico	699	701	0,422	C8H10O4	1350	
55,90	6,62	56,01	ácido octadienodióico	709	709	0,433	C8H10O4	1392	
40,00	4,90	40,08	ácido benzoico*	922	922	0,302	C7H6O2	1159	1159
58,45	6,81	58,56	acetil ácido benzóico	769	854	0,017	C9H8O3	1433	
61,00	5,76	61,10	3,4-dimetil, ácido benzoico*	709	741	0,544	C9H10O2	1474	1387

66,55	6,54	66,66	C2 ácido benzóico	732	736	0,723	C9H10O2	1566	
69,25	6,26	69,35	C3 ácido benzóico	760	789	0,012	C10H12O2	1612	
43,00	4,62	43,08	C1 dihidro ácido benzóico	719	839	0,008	C8H10O2	1200	
66,25	6,61	66,36	3-hidroxi 4-metoxi ácido benzoico*	857	864	0,779	C8H8O4	1561	1570
54,55	7,15	54,67	hidroxi ácido benzenoacético	685	691	0,149	C8H8O4	1371	
68,95	6,66	69,06	C1 hidroxi ácido benzenoacético	712	764	0,114	C9H10O3	1607	
27,40	3,97	27,47	3-ácido furanocarboxílico*	688	893	0,005	C5H4O3	988	1004
Ácidos carboxílicos				16 picos	5,457			1,647**	
33,70	5,28	33,79	2-octenal*	738	788	0,107	C8H14O	1073	1073
31,45	5,32	31,54	Benzenoacetaldeído*	839	843	0,012	C8H8O	1043	1042
39,25	5,25	39,34	C1 benzenoacetaldeído	675	852	0,075	C9H10O	1148	
76,15	7,44	76,27	4-hidroxi 2-metoxi fenil propenal*	789	794	0,161	C10H10O3	1740	1740
53,80	6,47	53,91	hidroxi benzaldeído	904	922	0,131	C7H6O2	1359	
55,60	6,91	55,72	C1 hidroxi benzaldeído	764	791	0,045	C8H8O2	1387	
56,20	6,23	56,30	C1 hidroxi benzaldeído	673	828	0,016	C8H8O2	1396	
58,30	6,57	58,41	C1 hidroxi benzaldeído	884	884	0,610	C8H8O2	1430	
40,45	5,54	40,54	dihidroxi benzaldeído	894	895	0,076	C7H6O3	1165	
50,20	6,15	50,30	acetoxi benzaldeído (ver)	777	777	0,273	C9H8O3	1303	
56,50	6,89	56,61	m-metoxi p-hidroxi benzaldeído*	956	956	2,627	C8H8O3	1401	1410
52,15	7,16	52,27	hidroxi isoftaldeído	848	892	0,041	C8H6O3	1334	
30,70	5,22	30,79	tetrahidro ftalíco anidro	760	814	0,079	C8H8O3	1033	
62,95	6,98	63,07	C1 hidroxi isoftaldeído	752	780	0,191	C9H8O3	1506	
39,10	6,82	39,21	furanil propenal	835	835	0,070	C7H6O2	1147	t ok
42,85	6,81	42,96	furanil propenal	784	806	0,090	C7H6O2	1199	
44,95	6,76	45,06	5-(hidroxi metil), 2-furanocarboxaldeído*	832	865	0,059	C6H6O3	1229	1224
71,80	7,66	71,93	C1 isopropilideno hexenal	664	735	0,255	C10H16O	1660	
Aldeídos				18 picos	4,918			2,967**	
16,75	4,55	16,83	2-ciclopenten-1-ona*	927	927	0,228	C5H6O	836	835
21,40	4,61	21,48	2-metil, 2-ciclopenten-1-ona*	914	914	0,040	C6H8O	908	910
25,60	5,29	25,69	3-metil, 2-ciclopenten-1-ona*	942	942	0,430	C6H8O	965	976
31,15	5,12	31,24	2,3-dimetil, 2-ciclopenten-1-ona*	793	813	0,068	C7H10O	1039	1052
33,85	5,42	33,94	3-etil, 2-ciclopenten-1-ona*	831	857	0,188	C7H10O	1075	1082
26,35	5,18	26,44	Cicloheptatrienona	781	881	0,014	C7H6O	975	
33,85	6,41	33,96	Cicloheptenona	665	701	1,431	C7H10O	1075	
49,60	7,00	49,72	C4 cicloheptanona	680	683	0,076	C11H20O	1295	
19,75	5,08	19,83	2-ciclopenteno-1,4-diona*	866	866	0,111	C5H4O2	884	884
30,10	5,17	30,19	3-metil, 1,2-ciclopentanodiona*	946	946	1,526	C6H8O2	1025	1043
30,25	5,73	30,35	2-ciclohexeno-1,4-diona*	801	877	0,012	C6H6O2	1027	1032
34,45	7,92	34,58	ciclohexanodiona	862	871	0,008	C6H8O2	1083	
66,70	5,70	66,80	C4 ciclohexadienona	743	810	0,066	C10H14O	1568	
31,60	5,74	31,70	hidroxi ciclohexanona	751	763	0,069	C6H10O2	1045	
31,90	6,96	32,02	hidroxi ciclohexenona	757	757	0,053	C6H8O2	1049	
33,70	4,87	33,78	C2 hidroxi ciclopentenona	719	911	0,046	C7H10O2	1072	
37,00	5,05	37,08	C2 hidroxi ciclopentenona	910	918	0,079	C7H10O2	1117	
44,05	7,16	44,17	hidroxi cicloheptatrienona	663	680	0,039	C7H6O2	1216	
53,50	5,74	53,60	C3 etenil hidroxi ciclohexenona	745	784	0,361	C11H14O2	1354	
59,50	5,55	59,59	C3 etenil hidroxi ciclohexenona	769	810	0,074	C11H14O2	1449	
62,35	6,37	62,46	C4 metoxi ciclopentenona	619	706	0,028	C10H16O2	1496	

65,35	6,80	65,46	4-isopropil 2-hidroxi,2,4,6-cicloheptatrienona*	748	749	0,110	C10H12O2	1546	1559
28,15	5,57	28,24	C1 hexenona	719	825	0,006	C7H12O	999	
31,30	6,05	31,40	nonanona	782	858	0,117	C9H18O	1041	
35,80	5,78	35,90	heptanodiona	612	796	0,374	C7H12O2	1101	
37,45	5,60	37,54	heptanodiona	656	870	0,046	C7H12O2	1124	
61,75	9,07	61,75	tridecanona	643	746	0,723	C13H26O	1485	
22,45	6,40	22,56	2(5H)-furanona*	901	901	0,111	C4H4O2	923	918
23,65	5,99	23,75	furanona	697	793	0,041	C4H4O2	939	
23,65	5,92	23,75	5-metil, 2(5H)-furanona*	873	904	0,017	C5H6O2	939	938
26,50	6,24	26,60	3-metil, 2(5H)-furanona*	791	794	0,087	C5H6O2	977	977
31,30	7,12	31,42	C1 furanona	944	944	1,243	C5H6O2	1041	
33,40	6,17	33,50	C2 furanona	778	845	0,008	C6H8O2	1069	
36,40	6,52	36,51	C2 furanona	882	899	0,182	C6H8O2	1109	
24,40	4,77	24,48	3-metil, 2,5-furanodiona*	732	774	0,021	C5H4O3	948	949
34,00	6,40	34,11	furanil butanona	521	789	0,441	C8H10O2	1077	
69,70	6,00	69,80	furanil pentenona	688	709	0,025	C9H10O2	1620	
26,80	6,15	26,90	metileno dihidro furanona	633	734	0,014	C5H6O2	981	
32,65	8,06	32,78	C1 hidroxi dihidro furanona	737	834	0,017	C5H8O3	1059	
34,00	6,47	34,11	C2 dihidro furanona	817	817	0,134	C6H8O2	1077	
37,60	7,60	37,73	acetil dihidro furanona	893	893	0,037	C6H8O3	1126	
46,00	6,38	46,11	etilideno hidroxi furanona	690	793	0,036	C6H6O3	1243	
50,80	6,18	50,90	benzofuranona	720	770	0,539	C8H6O2	1312	
69,55	7,97	69,68	C1 benzofuranona	831	896	0,096	C9H8O2	1618	
77,65	6,56	77,76	C2 benzofuranona	744	763	0,038	C10H10O2	1768	
26,05	6,35	26,16	2H-piran-2-ona*	896	898	0,294	C5H4O2	971	978
27,40	6,19	27,50	piranona	909	909	0,173	C5H4O2	989	
38,50	5,95	38,60	C2 piranona	691	747	0,019	C7H8O2	1138	
40,45	6,04	40,55	C2 piranona	784	804	0,071	C7H8O2	1165	
29,05	5,71	29,15	C1 dihidro piranona	753	757	0,582	C6H8O2	1011	
36,55	5,84	36,65	2-metil 3-hidroxi, 4-pirona*	951	951	0,883	C6H6O3	1111	1110
38,05	5,78	38,15	C1 hidroxi piranona	644	791	0,031	C6H6O3	1132	
45,40	6,15	45,50	C6 hidroxi dihidro piranona	687	687	0,386	C11H18O3	1235	
53,95	6,47	54,06	3,4-dihidro, 2H-1-benzopiran-2-ona*	663	735	0,096	C9H8O2	1361	1350
59,20	7,80	59,33	2H-1-benzopiran-2-ona*	908	908	0,033	C9H6O2	1445	1457
45,10	6,65	45,21	tetrahidro indenona	629	637	0,042	C9H12O	1231	
48,85	6,64	48,96	2,3-dihidro, 1H-inden-1-ona*	951	958	1,001	C9H8O	1284	1292
57,10	6,64	57,21	C1 indanona	585	741	0,511	C10H10O	1411	
72,70	8,29	72,84	hidroxi indanona	787	817	0,116	C9H8O2	1677	
75,85	7,42	75,97	C1 hidroxi indanona	639	682	0,031	C10H10O2	1735	
37,90	5,40	37,99	fenil, 2-propanona*	752	863	0,039	C9H10O	1130	1124
44,80	5,33	44,89	C1 fenil propanona	689	858	0,003	C10H12O	1226	
45,25	5,36	45,34	C1 fenil propanona	861	861	0,022	C10H12O	1233	
46,15	5,49	46,24	4-fenil, 2-butanona*	751	825	0,004	C10H12O	1245	1218
48,40	5,68	48,49	dihidroxi fenil etanona	844	863	0,160	C8H8O3	1277	
56,05	6,49	56,16	hidroxi fenil etanona	869	872	0,109	C8H8O2	1394	
59,05	6,65	59,16	4-hidroxi, acetofenona*	762	792	0,123	C8H8O2	1442	1442
62,05	6,78	62,16	4-hidroxi 3-metoxi acetofenona*	913	913	1,391	C9H10O3	1491	1491
63,40	6,68	63,51	C1 hidroxi acetofenona	924	928	0,273	C9H10O2	1514	

59,20	6,68	59,31	fenonxi propanona 1-(4-hidroxi 3-metoxi-fenil), 2-	758	761	0,058	C9H10O2	1445	
64,75	6,68	64,86	propanona*	819	854	0,107	C10H12O3	1536	1541
67,30	6,81	67,41	metoxi hidroxi fenil propanona	697	819	0,044	C10H12O3	1579	
56,65	7,14	56,77	C1 hidroxi octahidro naftalenona	738	757	0,619	C11H18O2	1404	
63,10	6,82	63,21	dihidroxi fenil etanona	809	832	0,019	C8H8O3	1509	
59,05	8,24	59,19	C1 octahidro cromenona	703	720	0,081	C10H16O2	1443	
61,00	7,74	61,13	C1 octahidro cromenona	685	704	0,182	C10H16O2	1474	
29,05	5,65	29,14	C1 benzoquinona	751	787	0,186	C7H6O2	1011	
27,10	4,90	27,18	4-acetiloxi butanona*	911	933	0,037	C6H10O3	984	985
60,40	6,34	60,51	trihidroxi etanona 1(2H)-Naphthalenone, 3,4,5,6,7,8-	561	774	0,019	C8H8O4	1464	
49,90	5,61	49,99	hexahidro-	650	668	0,041	C10H14O	1299	
58,00	7,02	58,12	ciclohexil etilideno hidroxi etanona	711	711	0,334	C10H16O2	1425	
Cetonas				81 picos		17,530		6,980**	
25,75	4,65	25,83	metoxi etanamina	760	999	0,015	C3H9NO	966	
30,85	6,07	30,95	C1 pirimidinona	701	706	0,615	C5H6N2O	1035	
45,85	7,45	45,97	octamina	725	751	0,035	C7H17N	1242	
50,80	5,34	50,89	benziletanolamina	740	803	0,010	C9H13NO	1312	
55,30	5,44	55,39	etoxi fenil propanamina	679	762	0,173	C11H17NO	1382	
64,00	6,88	64,11	C1 benzeno etamina	697	833	0,004	C9H13N	1524	
35,35	6,58	35,46	C1 piridazinona	797	802	0,088	C5H6N2O	1095	
53,35	7,81	53,48	piridinodicarboxilico anidrido	817	826	0,049	C7H3NO3	1352	
59,35	5,51	59,44	nitrogenado	759	842	0,036	C11H17NO	1447	
Compostos nitrogenados				9 picos		1,025		0,000**	
22,30	5,31	22,39	ciclohexenol	696	741	0,026	C6H10O	921	
29,80	6,09	29,90	C1 ciclopentanol	734	754	0,069	C6H12O	1021	
33,70	6,45	33,81	ciclohexenil metanol	634	634	0,044	C7H12O	1073	
46,75	6,04	46,85	C4 ciclohexanol	504	643	0,043	C10H20O	1254	
55,30	6,72	55,41	C2 ciclopentenil metanol	703	778	0,296	C8H14O	1382	
61,90	6,38	62,01	acetil etilideno ciclohexanol	703	725	0,030	C10H16O2	1489	
61,90	6,93	62,02	acetil etilideno ciclohexanol	610	667	0,206	C10H16O2	1489	
35,65	5,85	35,75	ciclopentenodiol	574	739	0,041	C5H8O2	1099	
46,75	6,21	46,85	ciclohexadienodiol	745	764	0,025	C6H8O2	1254	
39,10	5,94	39,20	C1 hidroxi ciclohexil metanol	705	711	0,157	C8H14O	1147	
57,25	6,97	57,37	pentadecinol	652	677	1,127	C15H28O	1413	
28,60	5,49	28,69	octanol	738	755	0,347	C8H18O	1005	
30,85	6,03	30,95	nonenol	625	741	0,268	C9H18O	1035	
34,00	5,31	34,09	decanol	707	756	0,015	C10H22O	1077	
51,70	4,84	51,78	2-(4-metoxi fenil) etanol*	711	738	0,066	C9H12O2	1326	1347
55,45	5,48	55,54	fenil metoxi propanol	536	739	0,419	C10H14O2	1384	
59,50	6,81	59,61	fenil pentenol	771	806	0,194	C11H14O	1450	
60,25	6,72	60,36	hidroxi metoxi benzenoetanol	718	718	0,027	C9H12O3	1462	
61,60	5,85	61,70	etoxi fenil propanol	813	841	0,523	C9H12O	1484	
66,55	6,41	66,66	etoxi fenil propanol	633	735	0,025	C11H16O2	1566	
68,65	6,81	68,76	etoxi fenil propanol	772	838	0,110	C11H16O2	1601	
45,10	5,87	45,20	C1 benzenometanol	685	781	0,036	C8H10O	1230	
47,50	6,37	47,61	C1 hidroxi fenol	918	924	0,070	C7H8O2	1265	
52,45	6,21	52,55	C2 hidroxi fenol	812	816	0,010	C8H10O2	1338	
Álcoois				24 picos		4,174		0,066**	

42,55	6,94	42,67	dianhidro glucopiranosose	787	787	0,158	C6H8O4	1195
55,45	6,85	55,56	anhidro galactosan	666	730	7,012	C6H8O4	1385
61,90	6,72	62,01	anhidro galactosan	642	728	1,206	C6H8O4	1489
44,80	6,94	44,92	anhidro manosan	683	706	0,072	C6H8O4	1226
44,35	7,10	44,47	anhidro manosan	767	791	0,026	C6H10O5	1220
45,70	7,39	45,82	anhidro manosan	803	808	0,041	C6H10O5	1239
57,85	6,25	57,95	acetona manosan	838	838	0,234	C9H14O5	1423
59,65	6,84	59,76	dianhidro deoxi hexopiranosose	654	764	0,091	C6H8O3	1452
60,10	6,24	60,20	anhidro isopropilideno galactopirose	691	851	0,015	C9H14O5	1459
Açúcares				9 picos	8,855			0,000**
Totais				232 picos	100,000			50,530

(¹⁺²t_R)^a: soma do tempo de retenção nas duas dimensões em minutos (soma do tempo da ¹D com o tempo da ²D); S^b: similaridade da biblioteca; R^c: similaridade modo reversa da biblioteca; A^d: área percentual calculada; LTPRI^e: índice retenção: IR_{calc.}=índice de retenção calculado para cada composto, IR_{lit.}= índice de retenção teórico referente à literatura (NIST).

* Identificação confirmada pelo LTPRI. A identificação dos demais compostos foi somente por comparação com os espectros da biblioteca do GCxGC/TOFMS (biblioteca Nist) e análise detalhada de cada espectro, não especificando as posições das ramificações e insaturações.;

**Soma das áreas percentuais dos compostos positivamente pelo LTPRI

Tabela 10: Identificação dos compostos da fase aquosa do bio-óleo bruto catalítico do bagaço da cana-de-açúcar (FA BC CAT) por GCxGC/TOFMS.

¹ t _R (min)	² t _R (s)	¹⁺² t _R (min) ^a	Nome	S ^b	R ^c	A (%) ^d	Fórmula	LTPRI ^e	
								IR _{Calc.}	IR _{Lit.}
12,85	2,93	12,90	Tolueno*	945	945	0,770	C7H8	771	769
18,25	3,34	18,31	etil benzeno	916	916	0,014	C8H10	860	
18,85	3,33	18,91	p-xileno*	914	917	0,007	C8H10	869	879
30,10	3,66	30,16	1-isopropil, 2-metil, benzeno*	924	925	0,010	C10H14	1024	1021
51,70	5,34	51,79	C6 benzeno	829	837	0,004	C12H18	1326	
31,75	4,67	31,83	indeno	772	831	0,027	C9H8	1046	1045
39,85	4,77	39,93	1-metil, 1H-indeno*	864	891	0,042	C10H10	1157	1172
49,90	5,41	49,99	1-metil, naftaleno*	868	873	0,019	C11H10	1298	1299
60,85	6,41	60,96	tetrahidro fenantreno*	594	594	0,158	C14H24	1472	
Hidrocarbonetos aromáticos				9 picos	1,051			0,875**	
10,90	2,32	10,94	metil, ciclohexano	904	920	0,015	C7H14	735	736
Hidrocarboneto saturado				1 pico	0,015			0,000**	
11,65	2,56	11,69	C1 ciclohexadieno	851	923	0,003	C7H10	749	
24,10	4,37	24,17	C3 ciclopenteno	794	804	0,060	C8H14	944	
26,65	5,02	26,73	C2 ciclohexadieno	729	736	0,003	C8H12	979	
11,80	3,33	11,86	HC ins	807	960	0,009	C4H6	752	
27,10	4,96	27,18	HC ins	746	796	0,221	C9H16	985	
28,00	4,77	28,08	HC ins	675	699	0,339	C9H16	996	
Hidrocarbonetos insaturados				6 picos	0,634			0,000**	
10,15	2,49	10,19	2,5-dimetil, furano*	943	944	0,060	C6H8O	722	728
45,85	5,77	45,95	Bifurano	809	819	0,035	C8H6O2	1241	
28,00	4,63	28,08	Benzofurano*	846	846	0,031	C8H6O	996	996
36,10	4,72	36,18	C1 benzofurano	830	844	0,018	C9H8O	1105	
36,40	4,79	36,48	2-metil, benzofurano*	729	847	0,076	C9H8O	1109	1109
44,20	4,79	44,28	4,7 dimetil, benzofurano*	789	829	0,008	C10H10O	1217	1220
41,80	6,27	41,90	octahidro benzofurano	744	746	0,013	C8H14O	1184	
44,20	5,24	44,29	2,3-dihidro, benzofurano*	704	812	0,006	C8H8O	1218	1223
47,65	6,64	47,76	dihidro benzofurano	824	828	0,075	C8H8O	1267	

47,50	5,86	47,60	metoxi benzofurano	877	881	0,054	C9H8O2	1265	
39,10	5,43	39,19	1,2-dimetoxi benzeno*	937	941	0,196	C8H10O2	1146	1149
45,70	5,27	45,79	4-metil, 1,2-dimetoxi benzeno*	921	925	0,097	C9H12O2	1239	1230
48,40	5,68	48,49	2-metil, 1,4-dimetoxi benzeno*	776	786	0,064	C9H12O2	1277	1260
51,55	5,17	51,64	C2 dimetoxi benzeno	809	809	0,013	C10H14O2	1324	
52,15	4,81	52,23	C2 dimetoxi benzeno	744	752	0,014	C10H14O2	1333	
44,20	6,36	44,31	dihidro metoxi pirano	785	807	0,007	C6H10O2	1218	
19,45	4,39	19,52	heptinil dioxolano	882	882	0,006	C10H16O2	879	
27,40	5,12	27,49	metoxi dioxolano	795	816	0,022	C4H8O3	989	
28,30	4,81	28,38	benzodioxole	782	813	0,009	C7H6O2	1000	
18,55	3,96	18,62	C1 metoxi oxirano	877	974	0,145	C4H8O2	865	
25,60	4,20	25,67	dimetoxi propano	795	811	0,002	C5H12O2	964	
30,85	5,95	30,95	metoxi butenino	738	811	0,035	C5H6O	1035	
36,10	5,33	36,19	butoxi butano	712	800	0,023	C9H20O2	1105	
40,90	5,92	41,00	dihidro benzodioxin	802	805	0,011	C8H8O2	1172	
39,10	5,87	39,20	C1 butoxi ciclohexeno	561	615	0,614	C11H20O	1147	
			Éteres	25 picos	1,633			0,538**	
26,65	4,59	26,73	Fenol*	943	943	3,692	C6H6O	978	977
32,20	4,70	32,28	2-metil, fenol*	940	940	2,352	C7H8O	1052	1052
33,70	4,73	33,78	3-metil, fenol*	935	935	2,522	C7H8O	1072	1074
36,25	4,85	36,33	2,6-dimetil, fenol*	758	758	0,115	C8H10O	1107	1105
38,35	4,73	38,43	4-etil, fenol*	911	922	0,164	C8H10O	1136	1136
39,10	4,81	39,18	2,4-dimetil, fenol*	948	948	0,750	C8H10O	1146	1149
39,85	4,65	39,93	3,5-dimetil, fenol*	683	701	0,015	C8H10O	1157	1169
40,45	4,83	40,53	3-etil, fenol*	895	895	0,475	C8H10O	1165	1171
42,40	5,03	42,48	3,4-dimetil, fenol*	884	884	0,028	C8H10O	1192	1193
43,30	4,90	43,38	2,4,6-trimetil, fenol*	802	902	0,049	C9H12O	1205	1204
44,50	4,70	44,58	2-propil, fenol*	865	876	0,017	C9H12O	1222	1221
44,95	4,77	45,03	C3 fenol	648	702	0,632	C9H12O	1228	
45,70	4,84	45,78	2-etil, 6-metil, fenol*	906	914	0,180	C9H12O	1239	1236
47,05	4,81	47,13	4-propil, fenol	885	885	0,022	C9H12O	1258	1260
47,65	5,01	47,73	C3 fenol	894	894	0,012	C9H12O	1266	
46,75	5,07	46,83	p-alil, fenol*	771	813	0,021	C9H10O	1254	1254
50,80	4,79	50,88	5-isopropil, 2-metil, fenol*	807	812	0,004	C10H14O	1312	1304
51,70	4,84	51,78	C4 fenol	787	854	0,053	C10H14O	1326	
55,45	5,47	55,54	C1 propenil fenol	598	684	0,358	C10H12O	1384	
60,85	6,38	60,96	C4 fenol	602	737	0,152	C10H14O	1472	
47,50	6,36	47,61	C1 hidroxil fenol	900	918	0,022	C7H8O2	1265	
52,45	6,23	52,55	C2 hidroxil fenol	796	799	0,014	C8H10O2	1338	
55,45	6,66	55,56	C1 hidroxil metoxil fenol	635	635	0,159	C8H10O3	1385	
59,65	6,76	59,76	hidroxil etil fenol*	761	797	0,146	C8H10O2	1452	1451
34,90	5,26	34,99	2-metoxil, fenol*	889	889	4,931	C7H8O2	1089	1089
38,50	4,38	38,57	metoxil fenol	807	818	0,024	C7H8O2	1138	
39,25	4,26	39,32	metoxil fenol	829	899	0,017	C7H8O2	1148	
40,60	4,04	40,67	metoxil fenol	804	845	0,007	C7H8O2	1167	
44,20	5,70	44,30	4-metoxil, fenol*	946	949	0,120	C7H8O2	1218	1235
41,50	5,02	41,58	4-metil, 2-metoxil, fenol*	887	889	0,087	C8H10O2	1180	1192
42,10	5,08	42,18	5-metil, 5-metoxil, fenol*	903	911	0,044	C8H10O2	1188	1202
42,55	5,12	42,64	C1 metoxil fenol	927	927	2,041	C8H10O2	1194	

45,10	5,62	45,19	isoproxi fenol	792	792	0,033	C9H12O2	1230	
48,70	4,99	48,78	4-etil, 2-metoxi, fenol*	948	953	0,876	C9H12O2	1281	1285
54,55	4,93	54,63	4-propil, 2-metoxi, fenol*	971	971	0,111	C10H14O2	1370	1375
55,00	5,07	55,08	C3 metoxi fenol	872	894	0,006	C10H14O2	1377	
57,10	6,36	57,21	vinil metoxi fenol	734	798	0,036	C9H10O2	1411	
53,35	6,28	53,45	2,6-dimetoxi fenol*	647	650	0,031	C8H10O3	1352	1355
54,25	6,58	54,36	dimetoxi fenol	673	674	0,150	C8H10O3	1366	
53,95	5,19	54,04	3-metoxi, 3-(2-propenil), fenol*	934	934	0,302	C10H12O2	1361	1359
57,25	5,41	57,34	2-metoxi, 4-(1-propenil), fenol*	888	888	0,094	C10H12O2	1413	1407
59,80	5,54	59,89	metoxi propenil fenol	914	914	0,036	C10H12O2	1454	
61,00	5,93	61,10	metoxi propenil fenol	729	744	0,020	C10H12O2	1474	
60,40	6,68	60,51	C2 hidroxí metoxi fenol	720	720	0,195	C9H12O3	1464	
42,70	5,46	42,79	1,2-benzenodiol (catecol)*	943	943	6,583	C6H6O2	1196	1200
48,10	6,18	48,20	benzenodiol	895	899	0,202	C6H6O2	1273	
47,20	5,43	47,29	3-metil, 1,2-benzenodiol*	960	960	0,829	C7H8O2	1260	1263
48,55	5,08	48,63	4-metil, 1,3-benzenodiol*	797	850	0,081	C7H8O2	1279	1294
49,15	5,44	49,24	C1 benzenodiol	944	945	1,166	C7H8O2	1288	
51,25	4,93	51,33	4-metil, 1,2-benzenodiol*	860	907	0,017	C7H8O2	1319	1295
52,15	5,62	52,24	C1 benzenodiol	722	807	0,005	C7H8O2	1333	
52,75	6,30	52,86	C1 benzenodiol	789	789	0,153	C7H8O2	1343	
53,20	6,92	53,32	C1 benzenodiol	777	787	0,101	C7H8O2	1350	
50,65	5,58	50,74	C2 benzenodiol	740	742	0,032	C8H10O2	1310	
52,60	5,45	52,69	C2 benzenodiol	849	860	0,041	C8H10O2	1340	
55,30	5,53	55,39	4-etil, 1,2-benzenodiol (4-etil catecol)*	932	937	1,281	C8H10O2	1382	1392
56,95	5,71	57,05	C2 benzenodiol	834	842	0,104	C8H10O2	1408	
57,55	6,26	57,65	C2 benzenodiol	753	860	0,017	C8H10O2	1418	
58,00	6,28	58,10	C2 benzenodiol	763	767	0,048	C8H10O2	1425	
61,15	5,49	61,24	C3 benzenodiol	821	829	0,146	C9H12O2	1476	
47,35	5,84	47,45	3-metoxi, 1,2-benzenodiol*	896	910	0,054	C7H8O3	1262	1268
52,60	5,78	52,70	2,3-dihidro, 1H-inden-5-ol*	927	928	0,091	C9H10O	1340	1335
53,65	6,17	53,75	indenol	808	837	0,022	C9H8O	1357	
57,85	5,69	57,94	C1 indanol	851	935	0,037	C10H12O	1423	
21,55	5,06	21,63	Dihidrocatecol*	746	746	0,098	C6H8O2	911	
		Fenóis		65 picos	32,223			26,084*	
								*	
12,55	3,35	12,61	2-hidroxí propanoato de etila*	785	805	0,125	C5H10O3	765	787
17,95	4,03	18,02	2-hidroxí acetato de etila*	916	953	0,010	C4H8O3	855	859
23,95	4,33	24,02	hidroxí propanoato de etila	696	755	0,011	C5H10O3	942	
24,25	4,42	24,32	hidroxí propanoato de etila	760	791	0,018	C5H10O3	946	
25,30	4,22	25,37	hidroxí propanoato de etila	858	916	0,005	C5H10O3	960	
31,45	4,68	31,53	hidroxí etanoato de propila	740	760	0,029	C5H10O3	1042	
39,85	4,86	39,93	hidroxí benzoato de etila	752	768	0,005	C9H10O3	1157	
63,85	6,38	63,96	4-hidroxí, 3-metoxi, benzoato de metila*	905	905	0,050	C9H10O4	1521	1525
11,05	2,97	11,10	etanoato de etila*	696	722	0,119	C5H10O2	738	728
18,40	4,21	18,47	Butyl glyoxylate*	788	884	0,091	C6H10O3	862	776
22,60	3,33	22,66	hexanoato de metila*	799	840	0,004	C7H14O2	924	925
29,95	3,50	30,01	heptanoato de metila*	854	854	0,001	C8H16O2	1022	1021
34,00	4,89	34,08	propanoato de pentila	737	759	0,014	C8H16O2	1076	

79,00	3,75	79,06	tetradecanoato de etila*	890	896	0,229	C16H32O2	1792	1792
85,60	3,86	85,66	hexadecanoato de metila	900	900	0,132	C17H34O2	1925	
93,55	4,35	93,62	9,12-octadecadienoato de metila*	926	926	0,311	C19H34O2	2097	2094
93,85	4,15	93,92	9-octadecenoato de metila*	910	911	0,134	C19H36O2	2104	2103
93,85	4,53	93,93	9,12,15-octadecatrienoato de metila*	905	907	0,016	C19H32O2	2104	2105
94,90	3,95	94,97	octadecanoato de metila*	877	877	0,058	C19H38O2	2128	2128
95,05	4,61	95,13	octadenoato de metila	808	822	0,012	C19H34O2	2132	
48,55	6,95	48,67	ciclohexanoato de etenila	702	710	0,341	C9H14O2	1280	
48,70	7,02	48,82	ciclopentanoato de etenila	692	699	3,011	C9H14O2	1282	
51,10	7,43	51,22	ciclohexanoato de fenila	694	698	1,453	C13H16O2	1317	
28,90	5,13	28,99	oxopentanoato de metila	877	883	0,011	C6H10O3	1009	
40,45	5,96	40,55	oxopentanodiato de dimetila	847	904	0,020	C7H10O5	1165	
26,35	4,89	26,43	metil 2-furoato*	918	918	0,021	C6H6O3	974	980
30,85	6,01	30,95	oxalato ciclohexil butil	817	865	0,256	C12H20O4	1035	
32,95	4,61	33,03	2-furanocarboxilato de etila*	699	777	0,063	C7H8O3	1062	1056
35,35	4,95	35,43	benzoato de metila*	846	891	0,029	C8H8O2	1094	1094
47,50	5,94	47,60	metoxi fenil acetato	802	817	0,013	C9H10O3	1265	
57,25	6,93	57,37	C4 ciclohexano peroxi carboxilato	722	901	0,336	C11H20O3	1413	
82,90	5,55	82,99	bi(2-metil, propil), 1,2-benzenodicarboxilato*	902	903	0,030	C16H22O4	1870	1871
112,00	5,47	112,09	diisooctil, 1,2-benzenodicarboxilato*	832	834	0,004	C24H38O4	2553	2532
			Ésteres	33 picos	6,961			1,296**	
10,00	5,87	10,10	ácido propanóico*	724	736	0,002	C3H6O2	720	721
11,20	2,07	11,23	ácido acético	992	992	0,225	C2H4O2	741	
11,50	2,37	11,54	ácido propanóico	836	855	0,025	C3H6O2	746	
12,10	2,61	12,14	2-metil, ácido propanóico*	703	876	0,002	C4H8O2	757	753
13,60	2,99	13,65	ácido butanoico*	793	826	0,593	C4H8O2	784	789
16,75	2,97	16,80	3-metil, ácido butanoico*	887	906	0,014	C5H10O2	836	839
17,35	2,99	17,40	ácido pentanóico	753	833	0,004	C5H10O2	845	
19,45	3,22	19,50	ácido pentanóico*	926	926	0,046	C5H10O2	879	879
26,65	3,48	26,71	ácido hexanóico*	929	929	0,066	C6H12O2	978	978
33,55	3,52	33,61	ácido heptanóico*	776	843	0,002	C7H14O2	1070	1071
87,10	4,06	87,17	n-ácido hexadecanóico*	793	821	0,011	C16H32O2	1957	1966
95,35	4,41	95,42	ácido octadecanóico*	897	902	0,104	C18H34O2	2138	2137
10,60	2,44	10,64	ácido propenóico	783	802	0,082	C3H4O2	730	
14,20	3,05	14,25	ácido butenóico	919	919	0,099	C4H6O2	795	
15,85	3,41	15,91	ácido butenóico	894	894	0,265	C4H6O2	822	
13,90	3,05	13,95	ácido butenóico	930	930	0,166	C4H6O2	789	
19,00	3,25	19,05	ácido pentenóico	884	889	0,010	C5H8O2	872	
19,75	3,50	19,81	ácido pentenóico	779	882	0,010	C5H8O2	884	
20,05	3,33	20,11	2-ácido pentenóico*	780	780	0,014	C5H8O2	888	873
20,95	3,41	21,01	ácido pentenóico	841	841	0,011	C5H8O2	902	
21,55	3,44	21,61	ácido pentenóico	848	848	0,010	C5H8O2	910	
22,15	3,67	22,21	2-metil, 2-ácido butenóico*	921	921	0,090	C5H8O2	918	941
27,70	3,99	27,77	3-ácido furancarboxílico*	870	870	0,011	C5H4O3	992	1004
34,00	7,10	34,12	C1 tetrahydro ácido furancarboxílico	844	875	0,005	C6H8O4	1077	

C1 tetrahydro ácido									
34,60	7,04	34,72	furancarboxílico	828	828	0,008	C6H8O4	1085	
15,55	3,58	15,61	C1 ácido propanóico anidrido	773	796	0,004	C8H14O3	817	
20,65	4,52	20,73	ácido pentanóico anidrido	835	835	0,007	C10H18O3	898	
40,15	4,94	40,23	ácido benzenocarboxílico*	935	935	0,219	C7H6O2	1161	1159
47,05	5,00	47,13	ácido benzenoacético*	724	736	0,002	C3H6O2	1258	1274
61,00	5,77	61,10	C2 ácido benzóico	730	825	0,152	C9H10O2	1474	
66,25	6,73	66,36	3-hidroxi, 4-metoxi ácido benzoico*	889	894	0,485	C8H8O4	1561	1570
69,25	6,27	69,35	C3 ácido benzóico 4-hidroxi, 3-metoxi ácido benzenoacético*	756	782	0,026	C10H12O2	1612	
71,50	6,68	71,61	benzenoacético*	777	826	0,270	C9H10O4	1654	1657
36,10	5,38	36,19	ciclopentenil ácido metanóico	725	742	0,023	C6H8O2	1105	
55,90	6,63	56,01	ácido octadienodióico	711	711	0,138	C8H10O4	1392	
Ácidos carboxílicos			35 picos		3,199			1,930**	
15,10	4,09	15,17	3-furaldeído*	936	936	0,135	C5H4O2	810	815
16,30	4,47	16,37	Furfural*	938	938	2,481	C5H4O2	829	832
25,15	5,02	25,23	Benzaldeído*	876	919	0,136	C7H6O	959	968
33,40	5,11	33,49	3-metil, benzaldeído*	905	906	0,031	C8H8O	1069	1059
34,30	5,28	34,39	4-metil, benzaldeído*	825	851	0,114	C8H8O	1081	1079
51,55	5,10	51,64	C3 benzaldeído	775	776	0,040	C10H12O	1324	
31,45	5,19	31,54	2-hidroxi benzaldeído*	938	938	0,204	C7H6O2	1043	1041
39,85	5,20	39,94	3-metil, 2-hidroxi, benzaldeído*	802	827	0,026	C8H8O2	1157	1164
40,45	5,55	40,54	dihidroxi benzaldeído	903	905	0,191	C7H6O3	1165	
56,65	6,93	56,77	metoxi hidroxi benzaldeído*	952	952	4,195	C8H8O3	1404	1410
60,10	6,98	60,22	3-hidroxi, 4-metoxi, benzaldeído*	867	880	0,015	C8H8O3	1460	1469
61,60	7,05	61,72	3,4-dimetoxi benzaldeído*	865	873	0,029	C9H10O3	1484	1490
67,75	6,54	67,86	etoxi metoxi benzaldeído	762	765	0,154	C10H12O3	1586	
50,35	6,12	50,45	4-acetoxi benzaldeído	788	789	0,156	C9H8O3	1305	1294
79,75	6,98	79,87	metoxi acetiloxi benzaldeído	775	819	0,200	C10H10O4	1807	
31,45	5,33	31,54	Benzenoacetaldeído*	940	943	0,032	C8H8O	1043	1042
39,25	5,26	39,34	C1 benzenoacetaldeído	815	845	0,030	C9H10O	1148	
21,85	4,58	21,93	C1 furancarboxaldeído	842	842	0,132	C6H6O2	914	
25,30	5,08	25,38	5-metil, furancarboxaldeído*	906	911	0,249	C6H6O2	961	965
45,10	6,70	45,21	5-(hidroxi, metil), 2- furanocarboxaldeído*	788	813	0,033	C6H6O3	1231	1224
62,95	6,99	63,07	C1 hidroxi benzenodicarboxaldeído	772	800	0,049	C9H8O3	1506	
39,40	6,86	39,51	dihidro carboxaldeído pirano	785	836	0,051	C6H8O2	1151	
11,95	3,51	12,01	hidroxi butanal	953	953	0,018	C4H8O2	755	
13,15	4,09	13,22	pentanal	812	812	0,070	C5H8O	776	
13,45	4,55	13,53	butanodial	880	904	0,054	C4H6O2	782	
18,70	4,40	18,77	hexadienal	848	848	0,112	C6H8O	867	
19,30	4,45	19,37	2,4-hexadienal (E,E)*	860	860	0,110	C6H8O	877	879
27,10	4,81	27,18	2,4-heptadienal (E,E)*	708	720	0,024	C7H10O	984	981
33,70	5,30	33,79	2-octenal (E)*	736	747	0,035	C8H14O	1073	1073
39,10	6,82	39,21	furanyl propenal	841	841	0,206	C7H6O2	1147	
40,30	5,61	40,39	fenil propanal*	831	845	0,006	C9H10O	1163	1162
76,15	7,51	76,28	3-(4-hidroxi, 2-metoxi fenil), 2- propenal*	848	851	0,443	C10H10O3	1740	1740
Aldeídos			32 picos		9,763			8,456**	
21,70	7,00	21,82	2(5H)-furanona*	961	961	5,133	C4H4O2	913	918

23,50	6,04	23,60	5-metil, 2(5H)-furanona*	933	933	1,359	C5H6O2	937	938
26,35	6,34	26,46	3-metil, 2(5H)-furanona*	820	823	0,929	C5H6O2	975	977
31,30	7,35	31,42	4-metil, 5H-furan-2-ona*	957	957	1,489	C5H6O2	1041	1052
24,55	5,32	24,64	5,5-dimetil, 2(5H)-furanona*	911	911	0,031	C6H8O2	951	952
36,40	6,54	36,51	C2 furanona	904	904	0,195	C6H8O2	1109	
21,55	6,60	21,66	dihidro, 2(3H)-furanona*	910	910	0,213	C4H6O2	911	915
24,25	5,92	24,35	3-metil, dihidro, 2(3H)-furanona*	823	823	0,013	C5H8O2	947	957
24,55	5,97	24,65	C1 dihidro furanona	924	924	0,020	C5H8O2	951	
26,65	6,52	26,76	metileno dihidro furanona	889	891	0,027	C5H6O2	979	
34,00	6,52	34,11	C2 dihidro furanona	854	854	0,340	C6H8O2	1077	
32,65	8,07	32,78	C1 hidroxil dihidro furanona	823	823	0,022	C5H8O3	1059	
37,60	7,61	37,73	acetil dihidro furanona	934	934	0,044	C6H8O3	1126	
16,30	4,27	16,37	2,5-furanodiona*	724	785	0,007	C4H2O3	829	830
24,25	4,81	24,33	3-metil, 2,5-furanodiona*	739	752	0,051	C5H4O3	946	949
31,00	5,81	31,10	C2 furanodiona	898	898	0,038	C6H6O3	1037	
50,80	6,19	50,90	benzofuranona	791	800	0,528	C8H6O2	1312	
53,35	7,82	53,48	isobenzofuranona	933	933	0,041	C8H6O2	1352	
68,95	8,06	69,08	C1 benzofuranona	844	918	0,005	C9H8O2	1607	
29,80	5,19	29,89	tetrahidro benzofuranodiona	788	790	0,155	C8H8O3	1021	
30,70	5,23	30,79	tetrahidro benzofuranodiona	776	804	0,097	C8H8O3	1033	
32,95	5,70	33,05	tetrahidro benzofuranodiona	768	776	0,060	C8H8O3	1063	
34,45	5,70	34,55	hexahidro benzofuranona	718	734	0,119	C8H12O2	1083	
53,20	6,56	53,31	C1 dihidro benzofuranona	702	709	0,008	C9H10O2	1350	
76,15	8,40	76,29	C2 hidroxil benzofuranona	689	775	0,154	C10H10O3	1741	
51,40	6,18	51,50	C1 indanona	887	887	0,017	C10H10O	1322	
56,20	6,51	56,31	C1 indanona	744	819	0,022	C10H10O	1396	
72,70	8,31	72,84	hidroxil indanona	783	789	0,021	C9H8O2	1677	
48,85	6,67	48,96	2,3-dihidro, 1H-inden-1-ona*	962	969	1,453	C9H8O	1284	1292
50,65	6,05	50,75	C1 dihidro indenona	697	801	0,085	C10H10O	1310	
25,90	6,43	26,01	2H-piran-2-ona*	915	920	1,025	C5H4O2	969	978
27,40	6,19	27,50	piranona	822	829	0,025	C5H4O2	989	
38,50	5,95	38,60	C2 piranona	783	783	0,035	C7H8O2	1138	
38,65	6,84	38,76	C2 piranona	801	801	0,013	C7H8O2	1141	
36,55	5,91	36,65	2-metil, 3-hidroxil, 4-pirona*	949	949	0,935	C6H6O3	1111	1110
38,05	5,80	38,15	C1 hidroxil piranona	762	811	0,028	C6H6O3	1132	
43,00	5,61	43,09	2-etil, 3-hidroxil, 4H-piran,4-ona*	687	735	0,009	C7H8O3	1201	1199
42,55	6,28	42,65	C1 metoxil piranona	739	873	0,012	C7H8O3	1195	
56,35	7,53	56,48	4H-1-benzopiran-4-ona*	870	886	0,049	C9H6O2	1399	1392
59,20	7,81	59,33	2H-1-benzopiran-2-ona*	816	848	0,031	C9H6O2	1445	1457
19,60	4,79	19,68	dihidro piranona	851	870	0,002	C5H8O2	882	
20,95	5,20	21,04	dihidro piranona	924	924	0,022	C5H6O2	903	
22,75	5,13	22,84	dihidro piranona	661	665	0,297	C5H6O2	927	
29,05	5,76	29,15	C1 dihidro piranona	763	768	0,357	C6H8O2	1011	
53,95	6,48	54,06	3,4-dihidro, 2H-1-benzopiran-2-ona*	706	710	0,058	C9H8O2	1361	1350
55,75	7,37	55,87	dihidro benzopiranona	848	848	0,023	C9H8O2	1390	
13,90	3,80	13,96	Ciclopentanona*	910	914	0,027	C5H8O	790	797
28,15	5,59	28,24	C1 ciclohexanona	756	775	0,141	C7H12O	999	
31,00	4,93	31,08	C2 ciclohexanona	599	612	0,071	C8H14O	1036	

32,20	5,54	32,29	C2 ciclohexanona	726	734	0,245	C8H14O	1053	
39,70	6,47	39,81	4-isopropil, ciclohexanona*	633	636	0,247	C9H16O	1155	1148
40,60	5,99	40,70	C1 etenil ciclopentanona	724	724	0,061	C8H12O	1167	
45,55	6,12	45,65	C1 etenil ciclopentanona	681	738	0,254	C8H12O	1237	
55,00	6,60	55,11	ciclohexil propanona	694	768	0,274	C9H16O	1378	
16,45	4,74	16,53	2-ciclopenten-1-ona*	909	909	6,071	C5H6O	832	835
19,60	5,14	19,69	2-ciclopenteno-1,4-diona*	888	889	0,382	C5H4O2	882	884
21,25	4,69	21,33	2-metil, 2-ciclopenten-1-ona*	958	958	1,914	C6H8O	906	910
22,15	4,47	22,22	C1 ciclopentenona	604	714	0,012	C6H8O	918	
23,05	5,16	23,14	2-ciclohexen-1-1-ona*	962	972	0,550	C6H8O	931	939
25,45	5,38	25,54	3-metil, 2-ciclopenten-1-ona*	955	955	2,089	C6H8O	963	973
26,35	5,19	26,44	cicloheptatrienona	793	876	0,045	C7H6O	975	
26,65	5,13	26,74	3-metil, 2-ciclopenten-1-ona*	744	794	0,025	C6H8O	979	976
27,70	4,83	27,78	C2 ciclopentenona	888	888	0,119	C7H10O	992	
28,00	4,80	28,08	C2 ciclopentenona	876	876	0,381	C7H10O	996	
28,00	4,85	28,08	3-metil, 2-ciclohexen-1-ona*	689	763	0,240	C7H10O	996	1010
29,80	5,13	29,89	C2 ciclopentenona	897	908	0,190	C7H10O	1021	
30,55	4,40	30,62	1-ciclohexe-1-nil etanona*	814	829	0,016	C8H12O	1030	1023
31,15	5,12	31,24	2,3-dimetil, 2-ciclopenten-1-ona*	896	896	0,339	C7H10O	1039	1040
32,35	5,49	32,44	C2 ciclohexenona	722	735	0,243	C8H12O	1055	
32,95	4,66	33,03	3,4,4,- trimetil, 2-ciclopenten-1-ona*	808	846	0,041	C8H12O	1062	1064
33,85	5,45	33,94	3-etil, ciclopenten-1-ona*	832	871	0,293	C7H10O	1075	1082
34,00	6,39	34,11	cicloheptenona	668	685	0,314	C7H10O	1077	
34,90	4,89	34,98	ciclooctenona	756	758	0,020	C8H12O	1088	
35,80	5,41	35,89	C2 ciclohexenona	769	780	0,055	C8H12O	1101	
36,25	5,42	36,34	2,5-dimetil, 2,5-ciclohexadieno-1,4-diona*	727	736	0,007	C8H8O2	1107	1129
38,20	5,04	38,28	C3 ciclopente-1-ona	716	746	0,026	C8H12O	1134	
38,80	5,96	38,90	ciclohexil etanona	714	714	0,042	C8H14O	1142	
49,90	5,60	49,99	C1 propenil ciclohexenona	723	735	0,016	C10H14O	1299	
29,50	5,76	29,60	ciclohexenodiona	774	795	0,072	C6H6O2	1017	
30,10	5,35	30,19	3-metil, 1,2-ciclopentanodiona*	940	940	2,488	C6H8O2	1025	1043
30,25	5,76	30,35	2-ciclohexeno-1,4-diona*	853	878	0,411	C6H6O2	1027	1032
22,45	4,90	22,53	2-hidroxi, 2-ciclopenten-1-ona*	819	939	0,020	C5H6O2	923	926
31,90	6,97	32,02	hidroxi ciclohexenona	773	779	0,034	C6H8O2	1049	
36,70	6,58	36,81	hidroxi ciclohexanona	865	865	0,097	C6H10O2	1113	
33,70	4,89	33,78	3,5-dimetoxi hidroxi ciclopenten-2-ona*	844	990	0,108	C7H10O2	1072	1093
34,00	5,28	34,09	C2 hidroxi ciclopentenona	757	757	0,037	C7H10O2	1077	
37,00	5,07	37,08	3-etil, 2-hidroxi, 2-ciclopenten-1-ona*	891	891	0,090	C7H10O2	1117	1140
40,60	6,23	40,70	C2 hidroxi ciclopentenona	724	894	0,040	C7H10O2	1167	
44,05	7,18	44,17	hidroxi cicloheptatrienona	734	763	0,086	C7H6O2	1216	
41,35	6,21	41,45	C2 hidroxi ciclopentenona	705	750	0,016	C7H10O2	1178	
56,65	7,20	56,77	C1 hidroxi octahidro naftaleno	723	740	0,241	C11H18O2	1404	
63,70	6,66	63,81	C3 hidroxi cicloheptatrienona	789	789	0,070	C10H12O2	1519	
37,90	5,41	37,99	1-fenil, 2-propanona*	926	937	0,172	C9H10O	1130	1124
44,95	5,33	45,04	fenil butanona	824	845	0,023	C10H12O	1228	
46,15	5,49	46,24	fenil butanona	871	873	0,017	C10H12O	1245	
45,25	5,37	45,34	C1 fenil propanona	842	844	0,062	C10H12O	1233	

51,25	5,95	51,35	difenil propanona	685	754	0,029	C15H14O	1319	
60,40	6,36	60,51	trihidroxi fenil etanona	765	766	0,059	C8H8O4	1464	
61,30	6,58	61,41	C1 fenil pentenona	804	817	0,019	C12H14O	1479	
67,30	6,84	67,41	metoxi hidroxi fenil propanona	722	865	0,389	C10H12O3	1579	
33,25	5,32	33,34	Acetofenona*	956	956	0,213	C8H8O	1067	1075
40,45	5,45	40,54	2-hidroxi, acetofenona*	793	816	0,017	C8H8O2	1165	1167
56,20	6,44	56,31	hidroxi acetofenona	920	920	0,035	C8H8O2	1396	
58,90	6,26	59,00	dihidroxi acetofenona	715	814	0,004	C8H8O3	1440	
63,10	6,83	63,21	dihidroxi acetofenona	811	811	0,058	C8H8O3	1509	
63,40	6,68	63,51	C1 hidroxi acetofenona	909	913	0,068	C9H10O2	1514	
62,05	6,88	62,16	4-hidroxi 3-metoxi acetofenona*	942	942	2,019	C9H10O3	1491	1491
66,55	6,97	66,67	3,4-dimetoxi, acetofenona*	743	774	0,041	C10H12O3	1566	1573
67,75	6,45	67,86	2,4-dimetoxi acetofenona*	678	716	0,012	C10H12O3	1586	1586
10,15	3,00	10,20	3-hidroxi, 2-butanona*	945	952	0,108	C4H8O2	722	720
12,70	3,23	12,75	C1 etoxi butanona	709	929	0,002	C7H14O2	768	
12,70	3,52	12,76	1-hidroxi, 2-butanona*	939	939	0,161	C4H8O2	768	748
15,55	3,79	15,61	4-hidroxi, 2-pentanona*	860	860	0,117	C5H10O2	817	818
16,90	3,63	16,96	4-metil, 4-hidroxi, 2-pentanona*	874	905	0,013	C6H12O2	838	841
18,55	4,54	18,63	acetiloxi propanona*	896	906	0,275	C5H8O3	865	862
25,45	4,72	25,53	1-hidroxi, 2-acetato, 2-butanona*	861	861	0,013	C6H10O3	962	964
25,60	7,85	25,73	dioxolanona	914	920	0,016	C3H4O3	965	
27,10	4,91	27,18	4-acetiloxi, 2-butanona*	819	923	0,201	C6H10O3	984	985
33,85	5,48	33,94	metoxi ciclohexanona	706	747	0,269	C7H12O2	1075	
64,75	6,72	64,86	hidroxi metoxi fenil propanona* 1-(4-hidroxi 3-metoxi fenil), 2- propanona*	877	877	0,760	C10H12O3	1536	1541
66,55	6,91	66,67	propanona*	840	864	0,044	C10H12O3	1566	1541
35,05	5,78	35,15	dihidro pentalenona	706	831	0,012	C8H8O	1091	
41,50	5,53	41,59	tetrahidro pentalenona	759	807	0,009	C8H10O	1180	
16,75	3,55	16,81	hexenona	691	817	0,016	C6H10O	836	
25,15	4,70	25,23	C2 butanona	871	917	0,052	C6H12O	958	
31,30	6,10	31,40	nonanona	825	915	0,088	C9H18O	1041	
61,90	0,03	61,90	6-tridecanona*	627	743	0,425	C13H26O	1487	1505
21,55	4,70	21,63	1-(2-furanil), etanona*	947	947	0,311	C6H6O2	910	910
29,05	4,81	29,13	C1 furanil etanona	820	832	0,006	C7H8O2	1010	
30,85	5,06	30,93	1-(5-metil-2-furanil) etanona*	938	941	0,016	C7H8O2	1035	1048
28,75	4,83	28,83	1-(2-furanil), propanona*	882	888	0,010	C7H8O2	1006	1005
34,45	5,64	34,54	2-hidroxi 1-(2-furanil), etanona*	850	850	0,065	C6H6O3	1083	1070
40,75	4,88	40,83	4-(5-metil-2-furanil), 2-butanona*	774	805	0,006	C9H12O2	1169	1160
			Cetonas	133	picos	40,391		33,145*	*
19,45	4,58	19,53	C1 piridanina	833	859	0,228	C5H6N2	879	
25,60	5,19	25,69	C1 pirimidinona	676	700	0,017	C5H6N2O	965	
31,00	6,04	31,10	C1 pirimidinona	691	700	0,093	C5H6N2O	1037	
12,70	3,86	12,76	C6 amina	815	815	0,262	C6H15N	768	
17,05	3,83	17,11	triazole	834	961	0,004	C2H3N3	841	
23,50	6,07	23,60	lisina	879	896	0,640	C6H14N2O2	937	
25,60	4,81	25,68	oxazol	841	908	0,004	C3H3NO	964	
25,90	4,50	25,98	pentanamina	711	740	0,016	C5H13N	968	
31,60	5,46	31,69	C1 pirazol	741	766	0,009	C4H6N2	1045	
35,50	5,05	35,58	C1 imidazol	746	820	0,012	C4H6N2	1097	

39,10	5,75	39,20	uracil	720	882	0,063	C4H4N2O2	1147	
46,75	6,74	46,86	butenil aziridina	700	751	0,015	C6H11N	1254	
12,70	3,79	12,76	formanida	721	728	0,273	C3H6N2O2	768	
14,20	3,31	14,26	glicina	855	999	0,025	C2H5NO2	795	
20,35	4,35	20,42	propanamida	733	774	0,030	C3H7NO	893	
27,40	4,63	27,48	C7 pirrolidinona	780	780	0,004	C11H21NO	988	
33,55	5,62	33,64	2(1H)-piridinona	791	843	0,005	C5H5NO	1071	1094
34,90	7,51	35,03	C1 pirrolidinadiona	945	945	0,025	C5H7NO2	1089	
35,05	6,61	35,16	C1 piridazinona	805	827	0,044	C5H6N2O	1091	
35,35	6,59	35,46	C1 piridazinona	793	802	0,088	C5H6N2O	1095	
44,95	5,40	45,04	formanida	712	967	0,014	CH3NO	1228	
Compostos nitrogenados				21 picos	1,871			0,005**	
11,65	2,92	11,70	Propanodiol*	901	933	0,001	C3H8O2	749	732
12,70	0,61	12,71	butanodiol	841	879	0,002	C4H10O2	767	
16,30	2,07	16,33	hexadienol	909	909	0,005	C6H10O	828	
28,75	5,44	28,84	octanol	785	821	0,093	C8H18O	1007	
35,50	4,63	35,58	nonanol	646	707	0,012	C9H20O	1096	
20,95	4,94	21,03	ciclopentanotriol	708	732	0,006	C5H10O3	903	
22,15	5,37	22,24	ciclohexenol	706	706	0,087	C6H10O	919	
29,80	6,11	29,90	C1 ciclopentanol	695	703	0,049	C6H12O	1021	
48,55	6,98	48,67	decahidro naftalenol	628	645	0,341	C10H18O	1280	
45,10	5,87	45,20	C1 benzenometanol	711	782	0,012	C8H10O	1230	
61,60	5,85	61,70	etoxi fenil propanol	784	821	0,021	C11H16O2	1484	
66,55	6,57	66,66	dihidro benzopiranol	723	751	0,871	C9H10O2	1566	
Álcoois				12 picos	1,500			0,001**	
42,70	6,95	42,82	dihidro glucopirranose	860	863	0,075	C6H8O4	1197	
44,80	6,96	44,92	anhidro manosan	829	833	0,029	C6H8O4	1226	
45,85	7,35	45,97	anhidro manosan	809	818	0,021	C6H8O4	1241	
55,45	6,78	55,56	anhidro galactosan	653	703	0,544	C6H8O4	1385	
57,85	6,26	57,95	acetonemanosan	807	807	0,083	C9H14O5	1423	
59,20	6,90	59,32	anhidro dideoxi mano						
59,20	6,90	59,32	hexapirranose	698	761	0,007	C6H10O3	1445	
Áçúcares				6 picos	0,759			0,000	
Totais				378 picos	100,00			72,330	

(¹⁺²t_R)^a: soma do tempo de retenção nas duas dimensões em minutos (soma do tempo da ¹D com o tempo da ²D); S^b: similaridade da biblioteca; R^c: similaridade modo reversa da biblioteca; A^d: área percentual calculada; LTPRI^e: índice retenção; IR_{calc.}=índice de retenção calculado para cada composto, IR_{lit.}= índice de retenção teórico referente à literatura (NIST).

* Identificação confirmada pelo LTPRI. A identificação dos demais compostos foi somente por comparação com os espectros da biblioteca do GCxGC/TOFMS (biblioteca Nist) e análise detalhada de cada espectro, não especificando as posições das ramificações e insaturações.;

**Soma das áreas percentuais dos compostos positivamente pelo LTPRI

Tabela 11: Identificação tentativa dos compostos do bio-óleo bruto de serragem de madeira Lignocel (BO SE) por GCxGC/TOFMS.

¹ t _R (min)	² t _R (s)	Nome	Área (%) ^a	Similaridade	Fórmula	PM ^b
6,20	14,35	C1 ácido propanóico	0,016	805	C4H8O2	88
6,40	14,69	ácido butanóico	0,350	755	C4H8O2	88
6,60	14,78	ácido isocrotônico	0,147	884	C4H6O2	86
7,00	3,10	ácido crotônico	0,154	915	C4H6O2	86
8,20	3,23	ácido pentenóico	0,087	868	C5H8O2	100
8,40	3,11	ácido pentanóico	0,017	708	C5H10O2	102

7,40	14,91	C1 ácido butanóico	0,023	770	C5H10O2	102
9,20	3,83	C1 ácido butenóico	0,113	882	C5H8O2	100
9,40	3,88	C1 ácido butenóico	0,103	841	C5H8O2	100
10,20	5,01	C1 ácido butanóico anidrido	0,007	784	C8H14O3	158
11,20	3,97	ácido hexanóico	0,086	954	C6H12O2	116
14,00	6,10	ácido metanóico	0,348	729	C7H8O2	124
15,40	11,76	ácido oxotetrahidro furano	0,005	815	C5H6O4	130
15,60	4,56	ácido heptanóico	0,034	879	C7H14O2	130
21,00	5,07	ácido octanóico	0,013	904	C8H16O2	144
26,80	5,41	ácido nonanóico	0,006	839	C9H18O2	158
36,60	12,60	ácido acetil benzóico	0,004	630	C9H8O3	164
40,60	11,05	C1 ácido cinâmico	0,018	676	C10H10O2	162
64,60	6,52	ácido tetradecanóico	0,009	647	C14H28O2	228
Ácidos carboxílicos			1,540		19 picos	
6,20	3,72	propanodiol	0,014	922	C3H8O2	76
6,80	3,01	C1 pentanol	0,011	618	C6H14O	102
12,60	6,91	C1 heptanol	0,042	723	C8H18O	130
13,40	7,48	furanometanol	0,108	620	C5H6O2	98
26,00	7,91	pentenol	0,158	789	C11H14O	162
27,20	8,39	naftalenometanol	0,106	695	C11H10O	158
29,80	8,87	naftalenometanol	0,019	742	C11H10O	158
32,00	8,22	C4 benzenometanol	0,042	712	C11H16O	164
52,60	11,37	C1 dihidro acenaftilenol	0,010	656	C13H12O	184
Álcoois			0,510		9 picos	
6,20	14,67	pentenal	0,043	725	C5H8O	84
6,40	3,00	C1 butenal	0,089	809	C5H8O	84
6,60	14,67	C1 butanal	0,088	733	C5H10O	86
7,80	5,03	anidrido maléico	0,014	933	C4H2O3	98
8,00	4,15	hexadienal	0,356	840	C6H8O	96
9,60	4,11	dihidro pirano carboxaldeído	0,022	837	C6H8O2	112
10,60	5,71	benzaldeído	0,297	923	C7H6O	106
15,00	7,19	C1 benzaldeído	0,153	922	C8H8O	120
15,60	7,56	C1 benzaldeído	0,068	875	C8H8O	120
20,00	7,98	C2 benzaldeído	0,032	681	C9H10O	134
20,80	8,13	C2 benzaldeído	0,021	858	C9H10O	134
23,20	8,97	C2 benzaldeído	0,004	642	C9H10O	134
26,00	8,12	C2 benzaldeído	0,019	731	C9H10O	134
31,00	10,09	C3 benzaldeído	0,024	717	C10H12O	148
13,80	6,95	hidroxi benzaldeído	0,340	949	C7H6O2	122
20,40	8,57	dihidroxi benzaldeído	0,036	732	C7H6O3	138
19,60	8,07	C1 hidroxi benzaldeído	0,236	896	C8H8O2	136
20,00	8,16	C1 hidroxi benzaldeído	0,008	877	C8H8O2	136
37,20	11,27	C1 hidroxi benzaldeído	0,106	761	C8H8O2	136
37,60	11,00	C1 hidroxi benzaldeído	0,004	806	C8H8O2	136
32,20	9,23	aril hidroxi benzaldeído	0,023	791	C10H10O2	162
34,60	9,74	aril hidroxi benzaldeído	0,108	787	C10H10O2	162
32,20	10,32	C1 metoxi benzaldeído	0,058	835	C9H10O2	150
34,60	12,76	hidroxi metoxi benzaldeído	0,367	937	C8H8O3	152
6,80	3,53	furfural	0,484	928	C5H4O2	96

7,20	3,92	furfural	3,628	944	C5H4O2	96
10,80	3,42	furaldeído	0,097	929	C5H4O2	96
14,60	6,99	C2 furaldeído	0,157	956	C7H8O2	124
10,60	5,99	C1 furanocarboxaldeído	5,742	926	C6H6O2	110
11,20	5,76	C1 furanocarboxaldeído	0,311	811	C6H6O2	110
12,00	5,45	C1 furanocarboxaldeído	0,087	938	C6H6O2	110
12,40	5,34	C1 furanocarboxaldeído	1,245	783	C6H6O2	110
14,00	7,20	benzenoacetaldéido	0,042	932	C8H8O	120
19,40	8,63	C1 benzenoacetaldéido	0,004	764	C9H10O	134
14,20	6,49	C1 ciclohexenocarboxaldeido	2,827	630	C8H12O	124
14,40	4,81	benzenopropanal	0,055	839	C9H10O	134
15,60	7,73	heptadienal	0,459	829	C7H10O	110
19,40	11,13	furanil propenal	0,012	760	C7H6O2	122
27,80	7,80	benzo furanil acetaldeido	0,006	836	C10H8O2	160
29,20	9,52	C1 benzenodicarboxaldeído	0,061	817	C9H8O2	148
31,60	10,17	C1 benzenodicarboxaldeído	0,067	829	C9H8O2	148
34,20	11,09	C1 benzenodicarboxaldeído	0,016	769	C9H8O2	148
30,20	10,77	fenil propenal	0,007	788	C9H8O	132
34,00	10,90	naftalenocarboxaldeído	0,008	765	C11H8O	156
34,20	10,82	naftanenocarboxaldeído	0,053	803	C11H8O	156
36,80	10,69	hidroxi naftaldeído	0,019	696	C11H8O2	172
38,60	11,28	hidroxi naftaldeído	0,015	821	C11H8O2	172
40,40	12,98	C1 hidroxi isofitaladeído	0,016	696	C9H8O3	164
41,00	11,00	C1 naftalenocarboxaldeído	0,005	772	C12H10O	170
Aldeídos			17,936		49 picos	
15,00	7,48	acetofenona	0,331	952	C8H8O	120
26,80	9,66	dihidroxi acetofenona	0,042	839	C8H8O3	152
34,00	10,47	metilendioxi acetofenona	0,006	743	C9H8O3	164
35,00	10,16	C2 hidroxi acetofenona	0,004	717	C10H12O2	164
36,60	10,23	C3 acetofenona	0,028	784	C11H14O	162
30,00	9,07	C2 benzofuranona	0,054	788	C10H10O2	162
33,40	10,15	C2 benzofuranona	0,028	678	C10H10O2	162
37,40	10,15	C3 benzofuranona	0,060	808	C11H12O2	176
9,00	6,78	dihidro furanona	0,082	959	C4H6O2	86
9,20	6,96	furanona	1,309	949	C4H4O2	84
10,00	6,56	C1 furanona	0,551	868	C5H6O2	98
10,20	6,69	dihidro furanodiona	0,020	884	C4H4O3	100
10,40	6,80	C1 dihidro furanona	0,024	932	C5H8O2	100
11,40	7,55	C1 furanona	0,304	835	C5H6O2	98
14,20	9,85	C1 furanona	0,050	918	C5H6O2	98
13,80	7,94	C2 furanodiona	0,174	914	C6H6O3	126
15,40	8,92	C2 furanona	0,114	783	C6H8O2	112
17,40	10,12	C2 furanona	0,041	927	C6H8O2	112
18,80	12,41	dihidro acetil furanona	0,009	902	C6H8O3	128
24,00	11,65	hexahidro indenona	0,019	669	C9H12O	136
27,20	12,00	dihidro indenona	0,437	948	C9H8O	132
28,60	10,79	C1 dihidro indenona	0,095	856	C10H10O	146
27,80	7,95	C2 dihidro indenona	0,052	816	C11H12O	160
28,20	7,95	C2 dihidro indenona	0,035	777	C11H12O	160

28,80	8,05	C2 dihidro indenona	0,162	824	C11H12O	160
34,80	8,18	C3 dihidro indenona	0,018	819	C12H14O	174
31,20	11,41	C1 indanona	0,084	847	C10H10O	146
32,60	10,25	C2 indanona	0,064	727	C10H10O	160
33,80	11,94	C1 indanona	0,047	805	C10H10O	146
34,80	12,26	C1 indanona	0,034	829	C10H10O	146
35,00	12,57	C1 indanona	0,036	801	C10H10O	146
31,60	11,77	hidroxi indanona	0,048	845	C9H8O2	148
38,40	10,47	C1 metoxi indanona	0,024	761	C11H12O2	176
32,80	12,49	dihidro naftalenona	0,008	837	C10H10O	146
34,40	8,15	C2 dihidro naftalenona	0,033	729	C12H14O	174
10,60	7,03	tetrahidro piranona	0,005	782	C5H8O2	100
11,00	7,64	piranona	0,446	899	C5H4O2	96
12,00	7,25	piranona	0,052	826	C5H4O2	96
11,40	7,95	dihidro piranona	0,033	845	C5H6O2	98
13,80	10,14	dihidro piranona	0,021	945	C5H6O2	98
13,00	7,16	piranodiona	0,025	721	C5H4O3	112
17,80	8,52	C1 hidroxi metoxi	0,079	891	C6H6O3	126
17,60	8,64	C1 hidroxi metoxi	0,006	814	C6H6O3	126
18,60	7,90	C1 fenil etanona	0,046	867	C9H10O	134
20,80	8,35	C1 fenil etanona	0,172	877	C9H10O	134
21,40	8,62	C1 fenil etanona	0,093	776	C9H10O	134
24,60	8,32	C2 fenil etanona	0,033	621	C10H12O	148
26,00	8,82	C2 fenil etanona	0,016	781	C10H12O	148
20,00	8,66	hidroxi fenil etanona	0,052	874	C8H8O2	136
26,60	8,91	C1 hidroxi fenil etanona	0,007	749	C9H10O2	150
36,40	11,00	fenil vinil etanona	0,162	834	C10H10O	146
37,00	11,38	fenil vinil etanona	0,121	793	C10H10O	146
70,60	12,61	tolil vinil fenil etanona	0,015	736	C17H16O	236
9,00	4,82	furanil etanona	1,868	913	C6H6O2	110
10,20	4,58	furanil etanona	0,039	871	C6H6O2	110
12,40	6,05	furanil propanona	0,083	847	C7H8O2	124
19,20	7,62	C1 furanil propanona	0,114	676	C8H10O2	138
20,60	7,74	C1 furanil butanona	0,034	785	C9H12O2	152
6,60	3,22	ciclopetanona	0,472	965	C5H8O	84
7,20	3,45	C1 ciclopetanona	0,573	705	C6H10O	98
7,20	4,13	ciclopenteno	3,214	936	C5H6O	82
7,80	4,02	ciclopenteno	0,141	837	C5H6O	82
8,40	4,94	ciclopentenediona	0,086	881	C5H4O2	96
8,80	4,75	C1 ciclopentenona	0,936	918	C6H8O	96
10,80	6,20	C1 ciclopentenona	2,507	943	C6H8O	96
9,80	4,49	C2 ciclopentanona	0,006	850	C7H12O	112
9,80	4,69	C2 ciclopentenona	0,146	838	C7H10O	110
10,00	4,81	C2 ciclopentenona	0,186	827	C7H10O	110
12,00	5,87	C2 ciclopentenona	0,785	892	C7H10O	110
13,60	6,89	C2 ciclopentenona	1,031	795	C7H10O	110
12,60	6,08	C3 ciclopentenona	0,017	647	C8H12O	124
14,80	6,38	C3 ciclopentenona	0,152	860	C8H12O	124
16,80	7,22	C3 ciclopentenona	0,463	706	C8H12O	124

9,40	5,18	hidroxi ciclopentenona	0,007	882	C5H6O2	98
15,40	6,76	C2 hidroxi ciclopentenona	0,094	771	C7H10O2	126
17,80	7,44	C2 hidroxi ciclopentenona	0,028	892	C7H10O2	126
13,20	6,73	C1 ciclopentadiona	0,378	934	C6H8O2	112
11,80	5,20	C2 ciclohexadienona	0,043	717	C8H10O	122
12,60	7,07	C1 etenil ciclopentanona	0,069	779	C8H12O	124
8,40	4,50	ciclohexanona	0,013	926	C6H10O	98
12,00	6,29	ciclohexanodiona	0,019	869	C6H8O2	112
11,20	7,27	ciclohexenodiona	0,016	704	C6H6O2	110
13,00	7,41	ciclohexenodiona	0,029	745	C6H6O2	110
13,40	7,56	ciclohexenodiona	0,194	846	C6H6O2	110
14,60	7,53	C1 ciclohexenona	0,066	903	C7H10O	110
16,60	7,28	C1 ciclohexenona	0,021	626	C7H10O	110
16,80	8,08	C2 ciclohexenona	0,018	714	C8H12O	124
17,60	8,42	C2 ciclohexenona	0,011	720	C8H12O	124
12,60	6,20	cicloheptanona	0,009	780	C7H12O	112
15,00	8,01	biciclo heptenona	0,087	821	C7H8O	108
13,00	5,64	ciclohexenil etanona	0,020	805	C8H12O	124
13,20	6,35	C1 ciclopentenil etanona	0,011	697	C8H12O	124
16,20	7,01	ciclohexenil etanona	0,084	877	C8H12O	124
18,40	7,67	etilideno ciclohexano	0,123	797	C8H12O	124
28,00	9,69	C1 propenil ciclohexenona	0,075	742	C10H14O	150
7,20	3,27	C1 pentenona	0,170	872	C6H10O	98
7,40	3,38	C3 butanona	0,099	609	C6H12O	100
7,80	4,50	C2 dodecadienona	0,078	813	C14H24O	208
8,40	3,36	heptanona	0,021	905	C7H14O	114
11,60	4,21	C1 hexanona	0,020	691	C7H14O	114
12,20	7,00	C1 hexenona	0,096	866	C7H12O	112
13,20	6,54	heptadienona	0,175	688	C7H10O	110
14,20	8,23	C2 heptanona	0,080	767	C9H18O	142
15,80	7,31	pentalenona	0,017	745	C8H10O	122
16,20	4,96	nonanona	0,004	794	C9H18O	142
16,60	8,12	C1 heptenona	0,011	716	C8H14O	126
6,40	14,92	hidroxi butanona	0,238	957	C4H8O2	88
7,00	3,35	hidroxi pentanona	0,032	773	C5H10O2	102
7,40	3,35	C1 hidroxi pentanona	0,259	843	C6H12O2	116
7,80	4,25	acetiloxi propanona	0,332	884	C5H8O3	116
9,60	5,40	hexanodiona	0,012	923	C6H10O2	114
11,00	5,25	C1 acetil furano	0,101	825	C7H8O2	124
11,80	5,63	benzociclobutenona	0,824	924	C8H6O	118
18,20	8,37	C1 benzil cetona	0,072	902	C9H10O	134
26,40	11,54	dihidro pentalenona	0,012	823	C8H8O	120
32,00	10,26	Hidroxi fenil butenona	0,122	772	C10H10O2	162
32,40	10,67	Hidroxi fenil butenona	0,028	751	C10H10O2	162
33,00	9,57	dihidroxi propiofenona	0,010	640	C9H10O3	166
33,20	7,79	C1 hidroxi fenil propanona	0,002	814	C10H12O2	164
39,80	12,81	hidroxi metoxi fenil etanona	0,136	917	C9H10O3	166
42,60	12,63	acenaftilenona	0,035	848	C12H8O	168
Cetonas			23,063	121	picos	

6,80	14,70	C1 etanoato de propila	0,253	704	C6H12O2	116
14,60	6,82	acetato de fenila	0,024	848	C8H8O2	136
6,20	14,61	Phenylacetic acid, 3-methylbut-2-enyl ester	0,669	640	C13H16O2	204
18,60	7,44	C1 metilato de fenila	0,049	699	C9H10O2	150
20,40	7,86	C1 acetato de fenila	0,031	856	C9H10O2	150
11,00	5,85	furancarboxilato de metila	0,232	911	C6H6O3	126
14,20	6,25	C1 furancarboxilato de pentila	0,012	663	C11H16O3	196
7,20	3,21	propenoato de metila anidrido	0,394	955	C8H10O3	154
9,20	3,51	hexanoato de metila	0,086	881	C7H14O2	130
18,00	4,91	octanoato de metila	0,006	769	C9H18O2	158
10,60	5,49	propanoato de etenila	0,071	836	C5H8O2	100
23,20	8,19	etenil acetato de fenila	0,260	864	C10H10O2	162
Ésteres			2,087		12 picos	
12,00	5,94	benzodioxole	0,683	882	C7H6O2	122
17,00	7,11	C1 benzodioxole	0,261	755	C8H8O2	136
17,00	6,17	C2 anisole	0,050	887	C9H12O	136
17,20	6,41	C2 anisole	0,104	842	C9H12O	136
28,80	8,74	dihidro benzopirano	0,022	628	C9H10O	134
48,80	12,14	dibenzo pirano	0,012	826	C13H10O	182
8,00	4,30	C2 furano	0,281	742	C6H8O	96
16,80	6,77	C1 benzofurano	0,779	900	C9H8O	132
17,00	6,92	C1 benzofurano	1,041	892	C9H8O	132
19,00	7,79	C1 benzofurano	0,008	756	C9H8O	132
21,20	7,43	C2 benzofurano	0,012	870	C10H10O	146
22,00	7,58	C2 benzofurano	0,204	875	C10H10O	146
22,60	7,65	C2 benzofurano	0,202	854	C10H10O	146
22,80	7,80	C2 benzofurano	0,012	861	C10H10O	146
23,00	7,69	C2 benzofurano	0,320	872	C10H10O	146
23,40	7,85	C2 benzofurano	0,421	828	C10H10O	146
23,80	8,03	C2 benzofurano	0,023	847	C10H10O	146
24,00	8,57	alil benzofurano	0,034	791	C10H8O	144
40,80	11,51	dibenzofurano	0,037	868	C12H8O	168
46,60	11,45	C1 dibenzofurano	0,013	785	C13H10O	182
19,80	7,65	dihidro benzofurano	0,010	815	C8H8O	120
23,60	8,43	dihidro benzofurano	0,016	841	C8H8O	120
35,60	11,19	C1 hidroxi benzofurano	0,034	804	C9H8O2	148
35,80	10,79	C1 hidroxi benzofurano	0,053	828	C9H8O2	148
35,00	10,67	C1 hidroxi benzofurano	0,017	802	C9H8O2	148
26,00	10,25	metoxi benzofurano	0,106	875	C9H8O2	148
29,00	10,15	bifurano	0,020	790	C8H6O2	134
16,20	7,95	C2 dihidro furano	0,016	719	C6H10O	98
26,20	9,34	C1 furfural furano	0,043	699	C9H8O2	148
14,60	4,47	vinil furano	0,035	805	C6H6O	94
44,00	12,93	naftofurano	0,010	703	C12H8O	168
54,80	12,17	C2 naftofurano	0,010	698	C14H12O	196
8,00	3,50	tetrahidro dimetoxi furano	0,040	749	C6H12O3	132
8,20	3,47	tetrahidro dimetoxi furano	0,051	729	C6H12O3	132
13,60	6,75	C1 acetil furano	0,117	867	C7H8O2	124

9,20	4,34	metoxi benzeno	0,073	775	C7H8O	108
12,40	5,30	C1 metoxi benzeno	0,113	847	C8H10O	122
12,80	5,51	C1 metoxi benzeno	0,249	920	C8H10O	122
21,80	6,64	C3 metoxi benzeno	0,016	795	C10H14O	150
22,60	6,99	C3 metoxi benzeno	0,006	778	C10H14O	150
34,40	8,00	C4 metoxi benzeno	0,051	794	C11H16O	164
33,20	8,22	C4 metoxi benzeno	0,014	820	C11H16O	164
18,80	7,27	etenil metoxi benzeno	0,066	897	C9H10O	134
24,40	7,93	propenil metoxi benzeno	0,024	689	C10H12O	148
27,00	8,27	propenil metoxi benzeno	0,038	838	C10H12O	148
27,80	9,02	propenil metoxi benzeno	0,042	719	C10H12O	148
19,20	8,73	dimetoxi benzeno	0,008	718	C8H10O2	138
14,00	7,49	C4 dioxolane	0,007	822	C7H14O2	130
20,40	9,65	benzodioxane	0,033	755	C8H8O2	136
47,40	11,43	xanteno	0,042	843	C13H10O	182
7,80	3,96	isobutil éter	0,293	832	C8H18O	130
Éteres			6,172		51 picos	
11,40	5,25	fenol	2,923	958	C6H6O	94
14,40	6,26	C1 fenol	3,410	939	C7H8O	108
15,60	6,45	C1 fenol	4,661	945	C7H8O	108
19,60	5,18	C1 fenol	0,135	813	C7H8O	108
18,80	6,98	C2 fenol	0,401	916	C8H10O	122
22,00	7,88	C2 fenol	0,220	932	C8H10O	122
20,60	7,32	C2 fenol	1,859	946	C8H10O	122
21,00	7,81	C2 fenol	0,248	938	C8H10O	122
19,40	7,21	C2 fenol	2,646	939	C8H10O	122
24,60	7,85	C3 fenol	1,287	912	C9H12O	136
25,20	7,55	C3 fenol	0,019	887	C9H12O	136
21,40	7,65	C3 fenol	0,072	865	C9H12O	136
24,00	7,60	C3 fenol	0,583	908	C9H12O	136
24,00	8,35	C3 fenol	0,057	902	C9H12O	136
26,40	8,16	C3 fenol	0,129	925	C9H12O	136
22,40	7,79	C3 fenol	0,361	924	C9H12O	136
23,60	7,44	C3 fenol	0,036	838	C9H12O	136
28,40	8,97	C3 fenol	0,065	821	C9H12O	136
29,40	8,99	C3 fenol	0,029	861	C9H12O	136
25,80	7,80	C3 fenol	0,556	938	C9H12O	136
22,40	7,21	C3 fenol	0,004	845	C9H12O	136
25,20	8,36	C4 fenol	0,076	751	C10H14O	150
29,00	7,72	C4 fenol	0,022	839	C10H14O	150
31,80	9,13	C4 fenol	0,026	844	C10H14O	150
32,20	8,55	C4 fenol	0,019	667	C10H14O	150
31,20	8,41	C4 fenol	0,034	702	C10H14O	150
28,20	7,79	C4 fenol	0,103	859	C10H14O	150
27,80	8,20	C4 fenol	0,045	846	C10H14O	150
27,00	8,04	C4 fenol	0,017	834	C10H14O	150
27,00	9,21	C4 fenol	0,006	682	C10H14O	150
29,20	7,98	C4 fenol	0,133	706	C10H14O	150
34,00	7,93	C5 fenol	0,011	712	C11H16O	164

30,80	9,19	alil fenol	0,097	888	C9H10O	134
28,00	8,78	alil fenol	0,033	790	C9H10O	134
35,60	9,39	C1 alil fenol	0,182	885	C10H12O	148
33,80	9,60	C1 alil fenol	0,140	802	C10H12O	148
33,20	9,20	C1 alil fenol	0,161	890	C10H12O	148
33,40	9,41	C1 alil fenol	0,022	830	C10H12O	148
25,80	8,21	propenil fenol	0,274	890	C9H10O	134
29,20	8,98	propenil fenol	0,143	894	C9H10O	134
31,00	9,34	propenil fenol	0,186	870	C9H10O	134
28,00	10,05	Benzenodiol	0,019	851	C6H6O2	110
23,80	7,59	benzenodiol	4,323	845	C6H6O2	110
30,40	9,83	C1 benzenodiol	0,033	831	C7H8O2	124
26,60	8,63	C1 benzenodiol	1,018	935	C7H8O2	124
29,80	8,02	C1 benzenodiol	1,533	801	C7H8O2	124
33,60	8,30	C2 benzenodiol	0,062	776	C8H10O2	138
34,00	9,21	C2 Benzenodiol	1,602	926	C8H10O2	138
32,00	8,69	C2 Benzenodiol	0,118	751	C8H10O2	138
32,20	9,03	C2 Benzenodiol	0,022	688	C8H10O2	138
39,60	9,19	C3 Benzenodiol	0,344	822	C9H12O2	152
31,80	9,42	dihidro indenol	0,018	734	C9H10O	134
29,40	10,02	dihidro indenol	0,086	879	C9H10O	134
30,80	10,02	dihidro indenol	0,808	939	C9H10O	134
30,40	10,62	indenol	0,129	863	C9H8O	132
31,60	11,02	indenol	0,879	885	C9H8O	132
31,00	10,76	indenol	0,030	870	C9H8O	132
31,80	10,91	indenol	0,749	880	C9H8O	132
35,40	10,08	C1 indanol	0,282	835	C10H12O	148
36,20	10,47	C1 indanol	0,132	747	C10H12O	148
37,20	10,44	C1 indanol	0,031	692	C10H12O	148
39,40	11,17	metoxi naftalenol	0,005	715	C11H10O2	174
41,20	12,63	naftalenol	0,016	844	C10H8O	144
41,80	12,75	naftalenol	0,044	926	C10H8O	144
48,60	13,33	C1 naftalenol	0,010	805	C11H10O	158
38,00	11,01	tetrahidronaftalenodiol	0,111	831	C10H12O2	164
24,40	9,30	isopropoxi fenol	0,043	871	C9H12O2	152
16,00	7,41	metoxi fenol	0,268	899	C7H8O2	124
16,20	7,32	metoxi fenol	0,268	916	C7H8O2	124
21,80	8,10	C1 metoxi fenol	0,176	939	C8H10O2	138
27,00	8,38	C2 metoxi fenol	0,215	806	C9H12O2	152
32,40	8,40	C3 metoxi fenol	0,026	800	C10H14O2	166
29,20	9,40	metoxi vinil fenol	0,062	667	C9H10O2	150
31,80	9,02	propenil metoxi fenol	0,112	889	C10H12O2	164
Fenóis			35,006		74 picos	
6,20	2,90	ciclopentano	0,179	777	C5H10	70
52,40	9,93	C5 azuleno	0,051	889	C15H18	198
7,40	2,69	C2 ciclohexadieno	0,054	885	C8H12	108
8,60	3,75	Ciclooctetraeno	0,213	526	C8H8	104
11,40	5,33	ciclopentadieno	2,058	426	C5H6	498
13,40	5,74	C1 cicloocteno	0,051	758	C9H16	124

18,20	7,83	octahidro indeno	0,015	640	C9H16	124
6,20	2,32	hidrocarboneto insaturado	0,017	917	C7H10	94
6,40	2,89	hidrocarboneto insaturado	0,225	741	C7H14	98
8,60	3,84	hidrocarboneto insaturado	0,033	662	C7H14	98
9,60	3,06	hidrocarboneto insaturado	0,405	901	C10H16	136
10,20	4,92	hidrocarboneto insaturado	0,014	676	C8H16	112
13,00	6,68	hidrocarboneto insaturado	0,379	672	C8H14	110
15,80	7,03	hidrocarboneto insaturado	0,182	665	C10H18	138
16,80	7,28	hidrocarboneto insaturado	0,135	689	C9H14	122
20,40	9,74	hidrocarboneto insaturado	0,049	702	C9H16	124
27,80	4,14	hidrocarboneto insaturado	0,006	839	C14H28	196
33,80	4,33	hidrocarboneto insaturado	0,009	811	C12H24	168
39,80	4,47	hidrocarboneto insaturado	0,005	846	C18H36	252
6,60	2,18	hidrocarboneto saturado	0,064	712	C8H18	114
34,40	4,08	hidrocarboneto saturado	0,003	888	C16H34	226
40,40	4,21	hidrocarboneto saturado	0,008	814	C14H30	198
46,00	4,35	hidrocarboneto saturado	0,005	762	C17H36	240
70,80	4,89	hidrocarboneto saturado	0,004	907	C27H56	380
Hidrocarbonetos alifáticos			4,165	24 picos		
15,80	5,83	butenil benzeno	0,114	861	C10H12	132
14,00	5,03	butenil benzeno	0,017	741	C10H12	132
21,00	6,92	C1 butinil benzeno	0,060	765	C11H12	144
28,40	7,86	C2 butinil benzeno	0,081	825	C12H14	158
25,20	7,80	C2 indeno	0,012	840	C11H12	144
32,60	8,20	C3 indeno	0,025	873	C12H14	158
33,00	8,34	C3 indene	0,018	640	C12H14	158
19,20	6,73	C1 dihidro indeno	0,073	864	C10H12	132
21,40	6,47	C2 dihidro indeno	0,023	850	C11H14	146
24,20	7,20	C2 dihidro indeno	0,007	837	C11H14	146
24,40	8,18	C2 dihidro indeno	0,013	730	C11H14	146
28,60	7,98	C3 dihidro indeno	0,009	678	C12H16	160
20,00	7,81	dihidro naftaleno	0,071	883	C10H10	130
19,20	7,15	dihidro naftaleno	0,252	922	C10H10	130
25,80	9,92	C1 etenil benzeno	0,004	780	C10H12	118
16,40	5,70	C2 etenil benzeno	0,007	787	C9H10	132
38,80	11,87	acenafteno	0,007	871	C12H10	154
55,00	14,79	fenantreno	0,013	906	C14H10	178
62,20	3,02	C1 fenantreno	0,020	864	C15H12	192
72,60	14,33	C3 fenantreno	0,014	744	C17H16	220
81,80	14,13	C5 fenantreno	0,028	686	C19H20	248
44,60	12,26	fluoreno	0,026	921	C13H10	166
51,20	12,42	C1 fluoreno	0,010	678	C14H12	180
50,60	11,96	C1 fluoreno	0,010	766	C14H12	180
21,20	8,71	naftaleno	0,452	949	C10H8	128
28,60	9,84	C1 naftaleno	0,276	894	C11H10	142
27,60	9,32	C1 naftaleno	0,329	924	C11H10	142
35,20	9,90	C2 naftaleno	0,061	823	C12H12	156
33,60	9,48	C2 naftaleno	0,030	830	C12H12	156
37,20	10,57	C2 naftaleno	0,076	899	C12H12	156

36,20	10,12	C2 naftaleno	0,015	896	C12H12	156
36,40	10,53	C2 naftaleno	0,044	907	C12H12	156
34,20	9,51	C2 naftaleno	0,118	893	C12H12	156
35,40	9,85	C2 naftaleno	0,120	878	C12H12	156
40,20	9,42	C3 naftaleno	0,023	833	C13H14	170
42,60	10,09	C3 naftaleno	0,015	867	C13H14	170
41,60	9,81	C3 naftaleno	0,010	838	C13H14	170
43,40	10,33	C3 naftaleno	0,014	817	C13H14	170
43,60	10,46	C3 naftaleno	0,012	871	C13H14	170
37,40	9,14	C3 naftaleno	0,013	919	C13H14	170
41,20	9,86	C3 naftaleno	0,009	814	C13H14	170
44,60	9,52	C4 naftaleno	0,026	875	C14H16	184
43,80	9,09	C4 naftaleno	0,016	828	C14H16	184
13,00	5,26	propenil benzeno	0,099	917	C9H10	118
13,80	6,22	propenil benzeno	0,381	931	C9H8	116
11,80	4,79	propenil benzeno	0,111	926	C9H10	118
15,60	5,60	C1 propenil benzeno	0,031	893	C10H12	132
18,60	6,47	C1 propenil benzeno	0,045	913	C10H12	132
18,20	6,10	C1 propenil benzeno	0,026	912	C10H12	132
19,80	7,26	tetrahidro naftaleno	0,013	889	C10H12	132
31,60	7,46	C3 tetrahidro naftaleno	0,017	896	C13H18	174
41,20	8,57	C4 tetrahidronaftaleno	0,025	811	C14H20	188
6,40	14,56	C1 benzeno	1,779	938	C7H8	92
7,80	3,18	C2 benzeno	1,140	947	C8H10	106
8,40	3,52	C2 benzeno	0,193	920	C8H10	106
11,60	4,44	C3 benzeno	0,161	933	C9H12	120
12,80	5,00	C3 benzeno	0,096	941	C9H12	120
11,20	4,33	C3 benzeno	0,073	917	C9H12	120
10,20	3,91	C3 benzeno	0,031	894	C9H12	120
10,60	4,01	C3 benzeno	0,222	932	C9H12	120
17,40	5,59	C4 benzeno	0,008	858	C10H14	134
15,40	5,17	C4 benzeno	0,035	917	C10H14	134
13,00	4,49	C4 benzeno	0,577	948	C10H14	134
15,80	5,28	C4 benzeno	0,019	915	C10H14	134
14,20	4,75	C4 benzeno	0,018	846	C10H14	134
14,80	5,05	C4 benzeno	0,009	790	C10H14	134
16,80	5,75	C4 bezeno	0,011	857	C10H14	134
16,80	5,07	C5 benzeno	0,010	750	C11H16	148
23,80	8,90	C5 benzeno	0,006	698	C11H16	148
27,00	9,01	C5 benzeno	0,005	724	C11H16	148
19,60	5,51	C5 benzeno	0,012	906	C11H16	148
37,80	9,11	C6 benzeno	0,023	641	C12H18	162
40,20	10,15	C6 benzeno	0,022	768	C12H18	162
39,80	10,53	C6 benzeno	0,010	805	C12H18	162
43,60	12,06	Benzonaftaleno	0,004	818	C13H10	166
11,20	4,64	fenil propeno	0,025	810	C9H10	118
Hidrocarbonetos aromáticos			7,807	76 picos		
9,40	5,62	Levoglucozano	0,197	720	C6H6O3	126
23,00	11,86	Dianidro - D- glucopiranos	0,021	810	C6H8O4	144

40,00	3,43	Anidro - D - glucopirranose	0,001	839	C6H10O5	162
Açúcares			0,220	3 picos		
6,40	3,06	formamida	0,163	818	C3H6N2O2	102
6,40	14,86	piridina	0,341	909	C5H5N	79
11,40	6,01	acetil Imidazol	0,128	781	C5H6N2O	110
11,80	5,89	C2 metanol pirazol	0,614	779	C6H10N2O	126
13,60	8,09	C1 Piridazinona	0,186	773	C5H6N2O	110
15,80	9,33	C1 pirimidina	0,062	711	C5H6N2O	110
Compostos nitrogenados			1,495	6 picos		
Totais			100,000	444 picos		

A^a: área percentual calculada; PM^b: massa molecular do composto

Tabela 12: Identificação tentativa dos compostos da fração BOF1 do bio-óleo de serragem de madeira Lignocel (BO SE) por GCxGC/TOFMS.

¹ t _R (min)	² t _R (s)	Nome	Área (%) ^a	Similaridade	Fórmula	PM ^b
44,00	8,17	C1 naftalenocarboxaldeído	0,024	731	C12H10O	170
46,80	8,17	metoxi naftalenocarboxaldeído	0,017	714	C12H10O2	186
51,80	9,27	bifenilcarboxaldeído	0,969	858	C13H10O	182
53,20	9,47	bifenilcarboxaldeído	0,323	838	C13H10O	182
54,00	9,90	bifenilcarboxaldeído	0,192	851	C13H10O	182
54,60	10,02	bifenilcarboxaldeído	0,061	877	C13H10O	182
79,00	10,42	C2 fenil benzeno etanal	0,036	721	C12H16O	176
60,60	11,58	hidroxi naftalenocarboxaldeído	0,040	836	C11H8O2	172
67,20	11,12	antracenocarboxaldeído	0,105	908	C15H10O	206
68,20	11,14	antracenocarboxaldeído	0,172	882	C15H10O	206
72,20	10,76	C1 antracenocarboxaldeído	0,030	777	C16H12O	220
56,00	10,18	fenil benzofurano	0,016	825	C14H10O	194
Aldeídos			1,985	12 picos		
6,80	13,97	pentanona	0,013	839	C5H8O	84
45,00	9,23	acenaftilenona	0,161	910	C12H8O	168
45,40	9,53	acenaftilenona	0,309	907	C12H8O	168
46,80	9,74	acenaftilenona	0,189	908	C12H8O	168
47,20	9,90	acenaftilenona	0,031	873	C12H8O	168
49,80	8,20	difenil propanona	0,058	835	C15H14O	210
54,20	8,38	fenil acetofenona	0,050	801	C14H12O	196
55,80	8,39	fenil acetofenona	1,287	795	C14H12O	196
57,20	8,84	fenil acetofenona	0,185	767	C14H12O	196
61,00	9,94	fenil acetofenona	0,017	715	C14H12O	196
59,60	8,49	C2 acetofeno	0,057	795	C14H12O	196
51,00	6,67	C5 indanona	0,035	797	C14H18O	202
62,80	9,62	fenil indanona	0,180	806	C15H12O	208
64,40	9,37	fenil indanona	0,250	814	C15H12O	208
63,00	10,42	antracenodiona	0,013	757	C14H8O2	208
70,00	9,27	bifenil butenona	0,027	728	C16H14O	222
73,80	12,67	C1 antracenodiona	0,014	831	C15H10O2	222
Cetonas			2,877	17 picos		
43,60	6,23	C4 benzofurano	0,015	709	C12H14O	174
43,80	8,72	dibenzofurano	0,206	913	C12H8O	168

49,80	8,57	C1 dibenzofurano	0,580	898	C13H10O	182
51,00	9,04	C1 dibenzofurano	0,306	897	C13H10O	182
50,60	8,56	xanteno	1,008	899	C13H10O	182
56,40	9,80	fenil benzofurano	0,077	879	C14H10O	194
57,40	9,06	fenil benzofurano	0,027	771	C14H10O	194
58,80	9,53	fenil benzofurano	0,223	881	C14H10O	194
74,20	11,58	benzonafto furano	0,099	898	C16H10O	218
75,20	12,01	benzonafto furano	0,075	899	C16H10O	218
75,80	12,01	benzoxanteno	0,038	896	C16H10O	218
76,80	12,44	benzonafto furano	0,073	897	C16H10O	218
79,60	11,36	fenantropirano	0,110	727	C17H12O	232
80,20	11,68	fenantropirano	0,118	725	C17H12O	232
Éteres			2,955	14 picos		
59,80	8,17	C2 fluorenol	0,035	791	C15H14O	210
61,20	8,23	C2 fluorenol	0,159	778	C15H14O	210
62,00	9,52	C2 fluorenol	0,220	796	C15H12O	208
65,60	10,92	bifenildiol	0,042	789	C12H10O2	186
88,40	12,54	terfenilol	0,014	777	C18H14O	246
89,40	12,92	terfenilol	0,075	779	C18H14O	246
Fenóis			0,546	6 picos		
8,00	2,89	C2 benzeno	1,360	958	C8H10	106
9,00	3,17	C2 benzeno	0,094	946	C8H10	106
11,60	3,52	C3 benzeno	0,060	900	C9H12	120
13,00	3,82	C3 benzeno	0,039	925	C9H12	120
14,60	3,81	C4 benzeno	0,017	918	C10H14	134
54,80	4,90	C5 benzeno	0,091	780	C11H16	148
47,40	5,04	C6 benzeno	0,018	845	C12H18	162
53,20	5,07	C6 benzeno	0,021	810	C12H18	162
54,40	4,89	C6 benzeno	0,072	776	C12H18	162
57,60	5,01	C6 benzeno	0,012	759	C12H18	162
58,60	5,13	C6 benzeno	0,065	828	C12H18	162
54,80	4,94	C6 benzeno	0,065	767	C12H18	162
47,20	4,92	C6 benzeno	0,026	916	C12H24	204
58,40	5,03	C7 benzeno	0,099	916	C13H28	232
67,20	5,12	C8 benzeno	0,011	769	C14H22	190
63,60	5,08	C8 benzeno	0,060	823	C14H22	204
62,20	5,02	C8 benzeno	0,012	818	C14H22	246
62,20	5,08	C8 benzeno	0,020	818	C14H22	246
68,80	5,23	C9 benzeno	0,013	792	C15H24	162
64,00	5,14	C10 benzeno	0,019	771	C16H26	246
73,40	5,17	C11 benzeno	0,040	872	C17H28	232
73,60	5,26	C11 benzeno	0,013	796	C17H28	232
74,00	5,05	C12 benzeno	0,012	702	C18H30	260
78,00	5,21	C15 benzeno	0,059	826	C21H36	288
86,40	5,34	C16 benzeno	0,024	822	C22H38	190
82,20	5,30	C16 benzeno	0,046	860	C22H38	232
90,40	5,39	C17 benzeno	0,026	779	C23H40	190
86,60	5,42	C17 benzeno	0,011	780	C23H40	316
90,60	5,48	C20 benzeno	0,012	749	C26H46	358

56,20	5,27	C1 alil benzeno	0,024	744	C10H12	132
61,20	5,86	C2 alil benzeno	0,020	813	C10H12	132
42,20	7,63	C1 bifenil	0,033	903	C13H12	168
42,60	7,80	C1 bifenil	0,031	901	C13H12	168
48,00	7,57	C2 bifenil	0,037	806	C14H14	182
48,20	7,56	C2 bifenil	0,124	911	C14H14	182
48,80	7,65	C2 bifenil	0,104	937	C14H14	182
49,20	7,77	C2 bifenil	0,064	887	C14H14	182
50,20	8,04	C2 bifenil	0,059	894	C14H14	182
50,40	8,45	C2 bifenil	0,040	777	C14H14	182
51,60	7,86	C2 bifenil	0,065	802	C14H14	182
52,40	7,93	C2 bifenil	0,012	762	C14H14	182
53,40	8,71	C2 bifenil	0,026	795	C14H14	182
53,60	8,02	C2 bifenil	0,244	860	C14H14	182
53,80	8,68	C2 bifenil	0,030	748	C14H14	182
54,20	9,32	C2 bifenil	1,154	703	C14H14	182
54,80	8,64	C2 bifenil	0,455	853	C14H14	182
56,00	9,19	C2 bifenil	0,645	883	C14H14	182
56,20	9,10	C2 bifenil	0,102	839	C14H14	182
57,40	9,63	C2 bifenil	0,021	821	C14H14	182
52,00	7,46	C2 bifenil	0,046	791	C14H14	182
57,00	8,37	C3 bifenil	0,907	810	C15H16	196
60,20	9,31	C3 bifenil	0,066	754	C15H16	196
61,40	8,69	C3 bifenil	0,171	753	C15H16	196
62,80	9,02	C4 bifenil	0,130	796	C16H18	196
60,60	8,00	C4 bifenil	0,393	746	C16H18	210
62,00	8,23	C4 bifenil	0,526	752	C16H18	210
62,60	8,52	C4 bifenil	0,033	722	C16H18	210
65,40	9,44	C4 bifenil	0,078	743	C16H18	210
58,00	7,53	C3 propenil naftaleno	0,015	778	C16H18	210
69,20	7,62	C6 bifenil	0,014	783	C18H22	238
70,40	7,65	C6 bifenil	0,141	818	C18H22	238
71,00	7,86	C6 bifenil	0,157	742	C18H22	238
71,80	8,52	C6 bifenil	0,194	810	C18H22	238
72,20	8,50	C6 bifenil	0,029	796	C18H22	238
74,40	9,16	C6 bifenil	0,022	750	C18H22	238
72,80	8,26	C6 bifenil	0,156	824	C18H22	238
39,40	7,60	C2 naftaleno	0,018	891	C12H12	156
39,40	7,99	C2 naftaleno	0,024	840	C12H12	156
40,20	8,04	C2 naftaleno	0,044	866	C12H12	156
40,40	6,97	C3 naftaleno	0,027	929	C13H14	170
42,80	7,31	C3 naftaleno	0,015	854	C13H14	170
43,00	7,44	C3 naftaleno	0,025	878	C13H14	170
43,20	7,17	C3 naftaleno	0,097	902	C13H14	170
43,40	7,45	C3 naftaleno	0,051	832	C13H14	170
43,60	7,82	C3 naftaleno	0,011	859	C13H14	170
43,80	7,53	C3 naftaleno	0,033	874	C13H14	170
44,20	7,49	C3 naftaleno	0,230	908	C13H14	170
44,20	7,89	C3 naftaleno	0,018	834	C13H14	170

44,40	7,94	C3 naftaleno	0,100	835	C13H14	170
44,80	7,38	C3 naftaleno	0,189	920	C13H14	170
45,80	7,54	C3 naftaleno	0,489	937	C13H14	170
46,60	7,78	C3 naftaleno	0,515	941	C13H14	170
47,60	8,18	C3 naftaleno	0,165	878	C13H14	170
47,80	8,31	C3 naftaleno	0,846	950	C13H14	170
48,00	8,22	C3 naftaleno	0,518	957	C13H14	170
48,80	8,47	C3 naftaleno	0,110	914	C13H14	170
49,40	8,66	C3 naftaleno	0,032	895	C13H14	170
46,20	7,14	C4 naftaleno	0,031	765	C14H16	184
46,80	6,93	C4 naftaleno	0,389	895	C14H16	184
47,20	7,17	C4 naftaleno	0,015	828	C14H16	184
47,80	7,17	C4 naftaleno	0,856	899	C14H16	184
48,00	7,38	C4 naftaleno	0,011	819	C14H16	184
48,60	7,06	C4 naftaleno	0,088	859	C14H16	184
48,60	7,20	C4 naftaleno	0,102	839	C14H16	184
49,00	7,39	C4 naftaleno	0,051	779	C14H16	184
49,60	7,25	C4 naftaleno	0,078	749	C14H16	184
49,60	7,36	C4 naftaleno	0,089	792	C14H16	184
51,00	8,01	C4 naftaleno	0,065	825	C14H16	184
51,60	7,61	C4 naftaleno	0,104	857	C14H16	184
52,40	8,14	C4 naftaleno	0,188	863	C14H16	184
52,60	7,57	C4 naftaleno	0,268	888	C14H16	184
53,40	7,88	C4 naftaleno	0,187	854	C14H16	184
53,60	7,96	C4 naftaleno	0,213	871	C14H16	184
54,60	7,99	C4 naftaleno	0,095	865	C14H16	184
55,80	8,49	C4 naftaleno	1,151	869	C14H16	184
52,20	7,14	C5 naftaleno	0,178	836	C15H18	198
52,40	6,83	C5 naftaleno	0,246	825	C15H18	198
55,20	7,58	C5 naftaleno	0,027	642	C15H19	198
53,00	7,27	C5 naftaleno	0,338	891	C15H18	198
53,20	6,96	C5 naftaleno	0,109	709	C15H18	198
53,40	7,11	C5 naftaleno	0,242	878	C15H18	198
54,40	7,23	C5 naftaleno	0,056	879	C15H18	198
54,80	7,08	C5 naftaleno	0,097	897	C15H18	198
55,60	7,51	C5 naftaleno	2,960	889	C15H18	198
56,80	7,58	C5 naftaleno	0,015	809	C15H18	198
58,20	7,70	C5 naftaleno	0,064	834	C15H18	198
58,60	7,76	C5 naftaleno	0,023	835	C15H18	198
60,80	7,92	C5 naftaleno	0,261	804	C15H18	198
61,20	8,10	C5 naftaleno	0,022	837	C15H18	198
62,40	8,21	C5 naftaleno	0,016	859	C16H20	198
63,40	8,54	C5 naftaleno	0,087	825	C16H20	198
53,00	6,57	C6 naftaleno	0,025	876	C16H20	212
53,20	6,68	C6 naftaleno	0,023	850	C16H20	212
55,20	6,64	C6 naftaleno	0,052	843	C16H20	212
55,40	6,96	C6 naftaleno	0,022	844	C16H20	212
55,60	6,62	C6 naftaleno	0,075	920	C16H20	212
58,20	7,24	C6 naftaleno	0,150	849	C16H20	212

58,60	7,11	C6 naftaleno	0,051	847	C16H20	212
59,20	7,19	C6 naftaleno	0,100	780	C16H20	212
59,80	7,02	C6 naftaleno	0,016	829	C16H20	212
59,20	7,34	C6 naftaleno	0,014	766	C16H21	212
59,80	7,32	C6 naftaleno	0,217	840	C16H20	212
60,80	7,28	C6 naftaleno	0,061	829	C16H20	212
67,40	10,89	fenil naftaleno	0,150	907	C16H12	204
67,60	10,75	fenil naftaleno	0,069	872	C16H12	204
70,40	11,21	fenil naftaleno	0,269	805	C16H12	204
70,80	11,21	fenil naftaleno	0,059	734	C16H12	204
71,00	11,50	fenil naftaleno	0,096	851	C16H12	204
71,20	11,34	fenil naftaleno	0,194	812	C16H12	204
81,40	10,98	C2 fenil naftaleno	0,801	792	C18H16	232
81,60	10,74	C2 fenil naftaleno	0,045	781	C18H16	232
84,00	11,49	C2 fenil naftaleno	0,043	787	C18H16	232
86,00	12,31	C2 fenil naftaleno	0,011	835	C18H16	232
86,40	12,39	C2 fenil naftaleno	0,030	804	C18H16	232
78,80	10,53	C2 fenil naftaleno	0,022	831	C18H16	232
44,20	6,55	C4 tetrahidro naftaleno	0,155	848	C14H20	188
48,40	6,23	C6 tetrahidro naftaleno	0,013	721	C15H22	202
62,80	6,34	C8 tetrahidro naftaleno	0,021	729	C18H28	244
39,80	9,20	acenaftileno	0,023	909	C12H8	152
41,80	8,99	acenafteno	0,025	902	C12H10	154
47,60	9,17	fluoreno	1,089	934	C13H10	166
49,80	9,77	fluoreno	0,151	916	C13H10	166
52,40	9,27	C1 fluoreno	0,065	738	C14H12	180
53,40	9,06	C1 fluoreno	0,031	835	C14H12	180
53,80	8,92	C1 fluoreno	0,676	921	C14H12	180
54,00	9,06	C1 fluoreno	0,777	932	C14H12	180
54,20	9,28	C1 fluoreno	1,155	934	C14H12	180
54,80	9,52	C1 fluoreno	0,530	931	C14H12	180
55,80	9,73	C1 fluoreno	0,025	866	C14H12	180
56,00	9,49	C1 fluoreno	0,118	884	C14H12	180
56,60	9,47	C1 fluoreno	0,075	867	C14H12	180
57,00	9,84	C1 fluoreno	0,105	904	C14H12	180
57,40	10,09	C1 fluoreno	0,039	900	C14H12	180
57,60	10,19	C1 fluoreno	0,023	901	C14H12	180
54,80	8,52	C2 fluoreno	0,334	892	C15H14	194
55,40	8,51	C2 fluoreno	0,056	819	C15H14	194
56,00	9,04	C2 fluoreno	0,204	865	C15H14	194
59,00	8,66	C2 fluoreno	0,069	821	C15H14	194
59,20	8,92	C2 fluoreno	0,158	801	C15H14	194
62,60	9,67	C2 fluoreno	0,115	858	C15H14	194
63,40	9,50	C2 fluoreno	0,040	843	C15H14	194
64,20	10,19	C2 fluoreno	0,037	875	C15H14	194
64,60	10,14	C2 fluoreno	0,021	856	C15H14	194
78,20	12,56	benzofluoreno	0,287	889	C17H12	216
79,00	12,50	benzofluoreno	0,052	878	C17H12	216
58,00	11,01	fenantreno	2,119	950	C14H10	178

58,60	10,79	antraceno	0,368	954	C14H10	178
63,80	10,47	C1 fenantreno/antraceno	0,663	942	C15H12	192
64,00	10,72	C1 fenantreno/antraceno	0,988	942	C15H12	192
64,60	10,44	C1 fenantreno/antraceno	0,199	934	C15H12	192
65,00	11,01	C1 fenantreno/antraceno	0,817	924	C15H12	192
65,20	11,23	C1 fenantreno/antraceno	3,358	923	C15H12	192
65,40	10,93	C1 fenantreno/antraceno	0,096	895	C15H12	192
53,00	8,82	dihidro fenantreno	0,041	819	C14H12	180
59,40	9,74	C1 dihidro fenantreno/antraceno	0,410	748	C15H14	194
60,40	8,98	C1 dihidro fenantreno/antraceno	0,647	886	C15H14	194
60,60	9,12	C1 dihidro fenantreno/antraceno	0,248	868	C15H14	194
60,60	9,97	C1 dihidro fenantreno/antraceno	0,334	741	C15H14	194
61,20	9,42	C1 dihidro fenantreno/antraceno	0,269	864	C15H14	194
61,40	9,17	C1 dihidro fenantreno/antraceno	0,115	830	C15H14	194
62,00	10,55	vinil fenantreno/antraceno	0,027	899	C16H12	204
74,40	12,36	vinil fenantreno/antraceno	0,028	881	C16H12	204
68,20	10,13	C2 fenantreno/antraceno	0,076	872	C16H14	206
69,00	10,36	C2 fenantreno/antraceno	0,304	899	C16H14	206
69,20	10,02	C2 fenantreno/antraceno	0,052	813	C16H14	206
69,20	10,72	C2 fenantreno/antraceno	0,107	884	C16H14	206
69,60	10,19	C2 fenantreno/antraceno	0,229	893	C16H14	206
69,80	10,35	C2 fenantreno/antraceno	0,267	883	C16H14	206
70,40	10,55	C2 fenantreno/antraceno	0,609	904	C16H14	206
70,60	10,66	C2 fenantreno/antraceno	0,798	887	C16H14	206
71,00	10,88	C2 fenantreno/antraceno	1,739	894	C16H14	206
71,40	10,95	C2 fenantreno/antraceno	0,209	891	C16H14	206
71,60	11,35	C2 fenantreno/antraceno	0,066	872	C16H14	206
72,00	11,11	C2 fenantreno/antraceno	0,239	889	C16H14	206
72,80	11,23	C2 fenantreno/antraceno	0,590	914	C16H14	206
73,00	11,32	C2 fenantreno/antraceno	0,019	745	C16H14	206
61,20	8,73	C2 dihidro fenantreno/antraceno	0,085	834	C16H16	208
61,60	8,82	C2 dihidro fenantreno/antraceno	0,090	771	C16H16	208
62,00	8,50	C2 dihidro fenantreno/antraceno	0,044	783	C16H16	208
62,20	9,25	C2 dihidro fenantreno/antraceno	0,018	819	C16H16	208
62,40	8,45	C2 dihidro fenantreno/antraceno	0,414	744	C16H16	208
63,40	9,29	C2 dihidro fenantreno/antraceno	0,019	793	C16H16	208
65,60	8,62	C2 dihidro fenantreno/antraceno	0,026	842	C16H16	208
65,80	8,73	C2 dihidro fenantreno/antraceno	0,059	821	C16H16	208
66,00	8,81	C2 dihidro fenantreno/antraceno	0,052	841	C16H16	208
66,20	9,00	C2 dihidro fenantreno/antraceno	0,038	846	C16H16	208
67,00	9,04	C2 dihidro fenantreno/antraceno	0,082	846	C16H16	208
67,20	9,28	C2 dihidro fenantreno/antraceno	0,145	817	C16H16	208
68,40	9,60	C2 dihidro fenantreno/antraceno	0,022	772	C16H16	208
68,80	9,63	C2 dihidro fenantreno/antraceno	0,079	861	C16H16	208
58,60	8,18	C2 hexahidro fenantreno/antraceno	0,088	703	C16H20	212
75,20	10,68	alil fenantreno/antraceno	0,083	748	C17H14	218
75,80	10,90	alil fenantreno/antraceno	0,069	808	C17H14	218
76,40	11,11	alil fenantreno/antraceno	0,083	788	C17H14	218
77,40	11,28	alil fenantreno/antraceno	0,108	882	C17H14	218

70,80	9,47	C3 fenantreno/antraceno	0,054	772	C17H16	220
72,00	9,82	C3 fenantreno/antraceno	1,507	799	C17H16	220
72,40	9,73	C3 fenantreno/antraceno	0,086	768	C17H16	220
73,60	10,03	C3 fenantreno/antraceno	0,075	782	C17H16	220
74,40	10,17	C3 fenantreno/antraceno	0,189	795	C17H16	220
75,40	10,16	C3 fenantreno/antraceno	0,142	868	C17H16	220
75,60	10,60	C3 fenantreno/antraceno	2,019	844	C17H16	220
76,60	10,87	C3 fenantreno/antraceno	0,023	752	C17H16	220
77,00	10,57	C3 fenantreno/antraceno	0,097	855	C17H16	220
77,40	10,60	C3 fenantreno/antraceno	0,036	785	C17H16	220
77,80	10,84	C3 fenantreno/antraceno	0,229	864	C17H16	220
78,00	11,08	C3 fenantreno/antraceno	0,182	871	C17H16	220
79,20	11,29	C3 fenantreno/antraceno	0,185	843	C17H16	220
68,60	5,13	C3 dihidro fenanteno/antraceno	0,117	752	C17H18	222
68,40	8,36	C3 dihidro fenanteno/antraceno	1,061	770	C17H18	222
68,60	8,13	C3 dihidro fenanteno/antraceno	0,164	751	C17H18	222
68,60	9,14	C3 dihidro fenanteno/antraceno	0,033	730	C17H18	222
68,80	8,61	C3 dihidro fenanteno/antraceno	0,130	754	C17H18	222
71,00	9,65	C3 dihidro fenanteno/antraceno	0,055	735	C17H18	222
74,80	8,38	C3 dihidro fenanteno/antraceno	0,178	721	C17H18	222
87,80	14,05	benza fenantreno/antraceno	0,055	930	C18H12	228
88,20	14,58	benza fenantreno/antraceno	0,069	918	C18H12	228
77,20	9,33	C4 fenantreno/antraceno	0,253	879	C18H18	234
77,20	9,66	C4 fenantreno/antraceno	0,565	913	C18H18	234
77,80	10,13	C4 fenantreno/antraceno	0,246	881	C18H18	234
78,00	9,75	C4 fenantreno/antraceno	0,325	899	C18H18	234
78,40	10,13	C4 fenantreno/antraceno	6,984	873	C18H18	234
78,60	10,44	C4 fenantreno/antraceno	6,512	915	C18H18	234
78,60	10,46	C4 fenantreno/antraceno	6,600	810	C18H18	234
78,80	9,71	C4 fenantreno/antraceno	0,063	881	C18H18	234
80,40	10,04	C4 fenantreno/antraceno	0,160	884	C18H18	234
81,00	10,43	C4 fenantreno/antraceno	0,087	874	C18H18	234
81,60	10,52	C4 fenantreno/antraceno	0,054	843	C18H18	234
82,40	10,81	C4 fenantreno/antraceno	0,112	835	C18H18	234
82,80	10,96	C4 fenantreno/antraceno	0,094	833	C18H18	234
67,80	8,60	C4 dihidro fenantreno/antraceno	0,021	795	C18H20	236
67,40	9,05	C4 dihidro fenantreno/antraceno C4 tetrahidro	0,480	752	C18H20	236
76,60	8,98	fenantreno/antraceno	0,069	753	C18H22	238
94,00	14,57	C1 benza fenantreno/antraceno	0,020	912	C19H14	242
81,60	9,42	C5 fenantreno/antraceno	0,229	763	C19H20	248
82,00	9,58	C5 fenantreno/antraceno	0,103	754	C19H20	248
83,00	9,50	C5 fenantreno/antraceno	0,429	840	C19H20	248
83,60	10,20	C5 fenantreno/antraceno	0,449	814	C19H20	248
83,80	10,26	C5 fenantreno/antraceno	0,157	811	C19H20	248
85,20	10,22	C5 fenantreno/antraceno	1,412	852	C19H20	248
98,80	14,06	C2 benzo fenantreno/antraceno	0,016	848	C20H16	256
99,60	14,58	C2 benzo fenantreno/antraceno	0,018	855	C20H16	256
71,60	12,27	pireno	0,228	924	C16H10	202
72,80	12,57	pireno	0,030	912	C16H10	202

76,80	11,78	C1 pireno	0,098	892	C17H12	216
79,20	12,78	C1 pireno	0,234	913	C17H12	216
80,20	13,19	C1 pireno	0,331	922	C17H12	216
80,40	13,30	C1 pireno	0,073	910	C17H12	216
80,60	13,16	C1 pireno	0,227	911	C17H12	216
83,60	12,18	C2 pireno	0,223	852	C18H14	230
83,80	12,69	C2 pireno	0,011	691	C18H14	230
84,40	12,50	C2 pireno	0,109	862	C18H14	230
85,00	12,51	C2 pireno	0,082	893	C18H14	230
85,20	12,66	C2 pireno	0,057	895	C18H14	230
85,40	12,90	C2 pireno	0,076	883	C18H14	230
93,00	14,26	C1 trifenileno	0,012	905	C19H14	242
Hidrocarbonetos aromáticos			81,695	286 picos		
43,40	3,33	hidrocarboneto saturado	0,028	922	C16H34	226
47,40	3,38	hidrocarboneto saturado	0,071	866	C17H36	240
49,20	3,39	hidrocarboneto saturado	0,049	918	C16H34	226
53,00	3,44	hidrocarboneto saturado	0,016	913	C17H36	240
54,60	3,47	hidrocarboneto saturado	0,130	919	C20H42	282
58,20	3,53	hidrocarboneto saturado	0,055	914	C18H38	254
59,80	3,55	hidrocarboneto saturado	0,119	916	C20H42	282
63,40	3,57	hidrocarboneto saturado	0,011	842	C28H58	394
64,80	3,60	hidrocarboneto saturado	0,237	905	C20H42	282
68,20	3,63	hidrocarboneto saturado	0,040	862	C18H38	254
69,40	3,69	hidrocarboneto saturado	0,198	906	C18H38	254
74,00	3,75	hidrocarboneto saturado	0,707	924	C27H56	380
77,00	3,79	hidrocarboneto saturado	0,080	883	C18H38	254
78,20	3,83	hidrocarboneto saturado	0,296	928	C27H56	380
82,40	3,89	hidrocarboneto saturado	0,462	940	C27H56	380
85,20	3,92	hidrocarboneto saturado	0,014	852	C18H38	254
86,40	3,94	hidrocarboneto saturado	0,828	924	C27H56	380
90,20	4,00	hidrocarboneto saturado	0,047	923	C27H56	380
93,80	4,08	hidrocarboneto saturado	0,028	915	C27H56	380
97,40	4,14	hidrocarboneto saturado	0,023	904	C27H56	380
100,80	4,21	hidrocarboneto saturado	0,019	888	C27H56	380
104,00	4,29	hidrocarboneto saturado	0,013	899	C27H56	380
43,00	3,49	hidrocarboneto insaturado	0,037	903	C16H32	224
48,60	3,59	hidrocarboneto insaturado	0,147	928	C16H32	224
49,40	3,62	hidrocarboneto insaturado	0,021	912	C16H32	224
50,00	3,67	hidrocarboneto insaturado	0,013	903	C16H32	224
53,60	3,70	hidrocarboneto insaturado	0,183	903	C16H32	224
54,20	3,65	hidrocarboneto insaturado	0,214	932	C18H36	252
54,80	3,69	hidrocarboneto insaturado	0,034	909	C16H32	224
55,40	3,75	hidrocarboneto insaturado	0,023	919	C16H32	224
59,40	3,72	hidrocarboneto insaturado	0,353	931	C18H36	252
60,00	3,75	hidrocarboneto insaturado	0,040	906	C16H32	224
60,60	3,82	hidrocarboneto insaturado	0,025	912	C18H36	252
63,80	3,83	hidrocarboneto insaturado	0,053	908	C18H36	252
64,40	3,79	hidrocarboneto insaturado	0,344	935	C18H36	252
64,80	3,85	hidrocarboneto insaturado	0,070	921	C18H36	252

65,60	3,87	hidrocarboneto insaturado	0,032	915	C18H36	252
69,00	3,87	hidrocarboneto insaturado	0,393	928	C18H36	252
69,60	3,90	hidrocarboneto insaturado	0,082	920	C18H36	252
70,20	3,96	hidrocarboneto insaturado	0,048	914	C18H36	252
73,60	3,93	hidrocarboneto insaturado	0,640	932	C22H44	308
74,00	3,97	hidrocarboneto insaturado	0,159	915	C18H36	252
74,80	4,00	hidrocarboneto insaturado	0,054	914	C18H36	252
76,20	3,95	hidrocarboneto insaturado	0,034	822	C16H32	224
76,20	3,98	hidrocarboneto insaturado	0,021	768	C12H24	168
78,00	4,00	hidrocarboneto insaturado	1,562	960	C22H44	308
78,40	4,03	hidrocarboneto insaturado	0,333	939	C22H44	308
79,00	4,09	hidrocarboneto insaturado	0,216	934	C22H44	308
81,40	4,06	hidrocarboneto insaturado	0,125	874	C18H36	252
82,00	4,08	hidrocarboneto insaturado	0,298	927	C22H44	308
82,60	4,07	hidrocarboneto insaturado	0,108	901	C22H44	308
83,20	4,14	hidrocarboneto insaturado	0,042	904	C22H44	308
85,60	4,16	hidrocarboneto insaturado	0,084	889	C20H40	280
86,00	4,15	hidrocarboneto insaturado	0,374	945	C22H44	308
86,40	4,17	hidrocarboneto insaturado	0,229	933	C22H44	308
87,20	4,20	hidrocarboneto insaturado	0,113	933	C22H44	308
Hidrocarbonetos alifáticos			9,973	56 picos		
Totais			100,000	391 picos		

A^a: área percentual calculada; PM^b: massa molecular do composto

Tabela 13: Identificação tentativa dos compostos da fração BOF2 do bio-óleo de serragem de madeira Lignocel (BO SE) por GC×GC/TOFMS.

¹ t _R (min)	² t _R (s)	Nome	Área (%) ^a	Similaridade	Fórmula	PM ^b
53,20	9,45	bifenil carboxaldeído	0,200	859	C13H10O	182
53,40	10,01	bifenil carboxaldeído	0,034	765	C13H10O	182
53,80	9,93	bifenil carboxaldeído	0,061	848	C13H10O	182
54,20	9,78	bifenil carboxaldeído	0,127	862	C13H10O	182
54,60	10,01	bifenil carboxaldeído	0,098	875	C13H10O	182
59,80	8,29	C1 fenoxi benzaldeído	0,118	699	C14H12O2	212
67,20	11,12	antracenocarboxaldeído	0,292	901	C15H10O	206
67,80	11,28	antracenocarboxaldeído	0,127	867	C15H10O	206
68,20	11,22	antracenocarboxaldeído	0,483	896	C15H10O	206
72,20	10,76	C1 antracenocarboxaldeído	0,081	624	C16H12O	220
73,00	10,97	C1 antracenocarboxaldeído	0,310	801	C16H12O	220
73,40	11,1	C1 antracenocarboxaldeído	0,094	825	C16H12O	220
73,60	11,27	C1 antracenocarboxaldeído	0,145	784	C16H12O	220
73,80	11,15	C1 antracenocarboxaldeído	0,321	845	C16H12O	220
Aldeídos			2,489	14 picos		
62,00	10,25	metoxi fluoreno	0,031	735	C14H12O	196
50,60	8,16	metoxi bifetil	0,126	805	C13H12O	184
50,80	8,21	metoxi bifetil	0,144	722	C13H12O	184
50,80	8,96	metoxi bifetil	0,044	710	C13H12O	184
49,80	8,54	C1 dibenzofurano	0,143	904	C13H10O	182
51,00	9,03	C1 dibenzofurano	0,094	890	C13H10O	182
51,80	9,25	C1 dibenzofurano	0,265	813	C13H10O	182

52,20	9,38	C1 dibenzofurano	0,580	818	C13H10O	182
52,60	9,49	C1 dibenzofurano	0,034	780	C13H10O	182
53,00	9,74	C1 dibenzofurano	0,150	747	C13H10O	182
56,80	8,83	C1 dibenzofurano	0,078	781	C13H10O	182
58,40	10,38	metoxi dibenzofurano	0,171	865	C13H10O2	198
56,40	9,8	fenil benzofurano	0,037	694	C14H10O	194
58,80	9,54	fenil benzofurano	0,122	857	C14H10O	194
56,20	8,39	C2 naftofurano	0,817	779	C14H12O	196
56,60	8,72	C2 naftofurano	0,170	808	C14H12O	196
57,00	8,42	C2 naftofurano	0,584	730	C14H12O	196
57,80	9,01	C2 naftofurano	1,253	850	C14H12O	196
58,40	9,07	C2 naftofurano	0,475	816	C14H12O	196
58,60	9,24	C2 naftofurano	0,220	826	C14H12O	196
59,20	9,37	C2 naftofurano	0,250	839	C14H12O	196
59,40	9,66	C2 naftofurano	0,180	821	C14H12O	196
59,60	9,48	C2 naftofurano	0,491	820	C14H12O	196
60,20	9,36	C2 naftofurano	0,289	808	C14H12O	196
60,60	9,69	C2 naftofurano	0,244	825	C14H12O	196
61,20	9,68	C2 naftofurano	0,011	699	C14H12O	196
61,80	10,09	C2 naftofurano	0,058	730	C14H12O	196
74,20	11,56	benzonaftofurano	0,107	894	C16H10O	218
75,60	11,99	benzonaftofurano	0,049	823	C16H10O	218
51,20	7,57	C2 metoxi benzopirano	0,316	693	C12H14O2	190
78,60	10,4	C2 metoxi benzopirano	0,021	609	C12H14O2	190
50,60	8,51	xanteno	0,356	894	C13H10O	182
75,00	11,99	benzoxanteno	0,109	894	C16H10O	218
76,80	12,43	benzoxanteno	0,094	905	C16H10O	218
Éteres			8,113	34 picos		
58,00	10,94	fenantreno/antraceno	1,682	950	C14H10	178
58,60	10,79	fenantreno/antraceno	0,304	945	C14H10	178
63,80	10,43	C1 fenantreno/antraceno	0,615	934	C15H12	192
64,00	10,67	C1 fenantreno/antraceno	1,002	910	C15H12	192
64,60	10,43	C1 fenantreno/antraceno	0,404	922	C15H12	192
65,00	10,96	C1 fenantreno/antraceno	0,985	805	C15H12	192
65,20	11,09	C1 fenantreno/antraceno	3,352	934	C15H12	192
68,00	9,86	C2 fenantreno/antraceno	0,078	691	C16H14	206
69,00	10,32	C2 fenantreno/antraceno	0,285	874	C16H14	206
69,20	10,02	C2 fenantreno/antraceno	0,017	774	C16H14	206
69,20	10,71	C2 fenantreno/antraceno	0,052	787	C16H14	206
69,60	10,17	C2 fenantreno/antraceno	0,194	900	C16H14	206
69,80	10,35	C2 fenantreno/antraceno	0,159	883	C16H14	206
70,40	10,51	C2 fenantreno/antraceno	0,593	893	C16H14	206
70,60	10,61	C2 fenantreno/antraceno	0,881	870	C16H14	206
70,80	10,38	C2 fenantreno/antraceno	0,150	821	C16H14	206
70,80	10,88	C2 fenantreno/antraceno	2,615	894	C16H14	206
71,00	10,84	C2 fenantreno/antraceno	1,325	847	C16H14	206
72,00	11,07	C2 fenantreno/antraceno	0,248	828	C16H14	206
72,60	11,33	C2 fenantreno/antraceno	0,601	908	C16H14	206
73,00	11,31	C2 fenantreno/antraceno	0,054	803	C16H14	206

68,20	10,12	C2 fenantreno/antraceno	0,083	743	C16H14	206
72,00	9,75	C3 fenantreno/antraceno	1,605	793	C17H16	220
72,40	9,73	C3 fenantreno/antraceno	0,122	749	C17H16	220
74,40	10,15	C3 fenantreno/antraceno	0,236	806	C17H16	220
74,80	10,27	C3 fenantreno/antraceno	0,078	741	C17H16	220
75,40	10,14	C3 fenantreno/antraceno	0,236	834	C17H16	220
75,60	10,53	C3 fenantreno/antraceno	1,889	837	C17H16	220
76,40	10,53	C3 fenantreno/antraceno	0,204	837	C17H16	220
76,80	10,69	C3 fenantreno/antraceno	0,099	741	C17H16	220
77,60	10,93	C3 fenantreno/antraceno	0,124	870	C17H16	220
78,00	11,05	C3 fenantreno/antraceno	0,133	861	C17H16	220
79,00	11,39	C3 fenantreno/antraceno	0,156	839	C17H16	220
68,00	9,38	C4 acenaftileno	0,023	710	C16H16	208
77,00	9,37	C4 fenantreno/antraceno	0,646	851	C18H18	234
77,20	9,63	C4 fenantreno/antraceno	0,550	903	C18H18	234
77,80	10,09	C4 fenantreno/antraceno	0,305	872	C18H18	234
78,00	9,73	C4 fenantreno/antraceno	0,501	901	C18H18	234
78,00	10,72	C4 fenantreno/antraceno	0,052	780	C18H18	234
78,40	10,17	C4 fenantreno/antraceno	28,746	710	C18H18	234
80,40	10,04	C4 fenantreno/antraceno	0,147	820	C18H18	234
80,60	10,13	C4 fenantreno/antraceno	0,037	672	C18H18	234
81,00	10,4	C4 fenantreno/antraceno	0,033	799	C18H18	234
82,40	10,79	C4 fenantreno/antraceno	0,053	838	C18H18	234
82,80	10,95	C4 fenantreno/antraceno	0,069	827	C18H18	234
81,00	9,04	C5 fenantreno/antraceno	0,075	744	C19H20	248
81,60	9,41	C5 fenantreno/antraceno	0,169	774	C19H20	248
82,40	9,6	C5 fenantreno/antraceno	0,125	677	C19H20	248
82,60	9,55	C5 fenantreno/antraceno	0,366	868	C19H20	248
83,00	9,47	C5 fenantreno/antraceno	0,403	831	C19H20	248
83,60	9,62	C5 fenantreno/antraceno	0,023	608	C19H20	248
83,60	10,17	C5 fenantreno/antraceno	0,282	712	C19H20	248
85,00	10,26	C5 fenantreno/antraceno dihidro	1,409	849	C19H20	248
53,00	8,8	fenantreno/antraceno C1 dihidro	0,052	820	C14H12	180
55,60	8,88	fenantreno/antraceno C1 dihidro	0,056	814	C15H14	194
55,80	9,12	fenantreno/antraceno C1 dihidro	0,037	851	C15H14	194
60,00	8,86	fenantreno/antraceno C1 dihidro	0,329	876	C15H14	194
60,40	8,97	fenantreno/antraceno C1 dihidro	0,561	875	C15H14	194
60,60	9,09	fenantreno/antraceno C1 dihidro	0,279	869	C15H14	194
60,60	9,93	fenantreno/antraceno C1 dihidro	0,375	829	C15H14	194
64,20	10,17	fenantreno/antraceno C2 dihidro	0,041	818	C15H14	194
61,00	8,65	fenantreno/antraceno C2 dihidro	0,029	839	C16H16	208
61,20	8,74	fenantreno/antraceno	0,135	799	C16H16	208
62,00	8,49	C2 dihidro	0,050	755	C16H16	208

		fenantreno/antraceno				
		C2 dihidro				
62,40	8,43	fenantreno/antraceno	0,236	734	C16H16	208
		C2 dihidro				
64,20	8,62	fenantreno/antraceno	0,029	669	C16H16	208
		C2 dihidro				
65,80	8,73	fenantreno/antraceno	0,026	655	C16H16	208
		C2 dihidro				
66,20	8,97	fenantreno/antraceno	0,020	743	C16H16	208
		C2 dihidro				
67,20	9,26	fenantreno/antraceno	0,035	779	C16H16	208
		C2 dihidro				
67,60	9,07	fenantreno/antraceno	0,119	761	C16H16	208
		C2 dihidro				
67,80	9,23	fenantreno/antraceno	0,012	834	C16H16	208
		C2 dihidro				
68,40	9,54	fenantreno/antraceno	0,013	713	C16H16	208
		C2 dihidro				
68,40	9,59	fenantreno/antraceno	0,101	763	C16H16	208
		C2 dihidro				
68,80	9,62	fenantreno/antraceno	0,072	844	C16H16	208
		C3 dihidro				
68,40	8,32	fenantreno/antraceno	1,086	764	C17H18	222
		C3 dihidro				
68,60	8,12	fenantreno/antraceno	0,122	734	C17H18	222
		C3 dihidro				
68,80	8,61	fenantreno/antraceno	0,113	749	C17H18	222
		C3 dihidro				
74,80	8,37	fenantreno/antraceno	0,120	763	C17H18	222
		C4 dihidro				
67,40	9,02	fenantreno/antraceno	0,516	739	C18H20	236
		C4 dihidro				
73,00	8,78	fenantreno/antraceno	0,162	753	C18H20	236
		C3 tetrahidro				
66,80	8,02	fenantreno/antraceno	0,086	605	C17H20	224
		C4 tetrahidro				
75,00	8,13	fenantreno/antraceno	0,549	643	C18H22	238
		C4 tetrahidro				
76,60	8,98	fenantreno/antraceno	0,062	694	C18H22	238
		C4 tetrahidro				
79,20	8,68	fenantreno/antraceno	0,014	622	C18H22	238
		C4 tetrahidro				
75,00	8,43	fenantreno/antraceno	0,386	676	C18H22	238
		C2 hexahidro				
67,80	7,4	fenantreno/antraceno	0,128	653	C16H20	212
75,20	10,65	alil fenantreno/antraceno	0,066	669	C17H14	218
77,20	11,4	alil fenantreno/antraceno	0,133	837	C17H14	218
80,20	12,33	alil fenantreno/antraceno	0,016	781	C17H14	218
88,20	14,57	benza fenantreno/antraceno	0,036	917	C18H12	228
6,20	14,33	tolueno	0,021	860	C7H8	92
8,00	14,89	C2 benzeno	0,143	944	C8H10	106
54,80	4,89	C5 benzeno	0,042	796	C11H16	148
54,40	4,89	C6 benzeno	0,027	774	C12H18	162
55,40	4,92	C6 benzeno	0,043	731	C12H18	162
53,00	4,96	C7 benzeno	0,029	807	C13H20	176
58,40	5,03	C8 benzeno	0,064	835	C14H22	190
58,60	5,14	C9 benzeno	0,038	796	C15H24	204
63,60	5,08	C9 benzeno	0,046	825	C15H24	232

68,60	5,13	C11 benzeno	0,025	853	C17H28	232
68,80	5,22	C12 benzeno	0,014	726	C18H30	246
73,60	5,26	C13 benzeno	0,021	671	C19H32	260
73,40	5,17	C14 benzeno	0,039	837	C20H34	274
78,00	5,21	C15 benzeno	0,040	784	C21H36	288
82,20	5,29	C16 benzeno	0,037	824	C22H38	302
82,40	5,38	C16 benzeno	0,044	772	C22H38	302
86,40	5,33	C17 benzeno	0,025	707	C23H40	316
90,40	5,38	C19 benzeno	0,024	568	C25H44	344
53,60	8,03	C2 bifenil	0,111	692	C14H14	182
54,60	8,3	C2 bifenil	0,072	744	C14H14	182
54,60	8,71	C2 bifenil	0,222	794	C14H14	182
54,80	8,61	C2 bifenil	0,075	732	C14H14	182
55,40	8,85	C2 bifenil	0,074	857	C14H14	182
55,80	9,01	C2 bifenil	0,082	791	C14H14	182
56,00	9,16	C2 bifenil	0,193	871	C14H14	182
56,80	9,19	C2 bifenil	0,035	671	C14H14	182
54,40	7,46	C3 bifenil	0,045	719	C15H16	196
59,40	8,18	C3 bifenil	0,030	724	C15H16	196
61,60	8,74	C3 bifenil	0,065	646	C15H16	196
62,40	9,05	C3 bifenil	0,049	784	C15H16	196
57,00	8,35	C3 bifenil	0,664	819	C15H16	196
58,40	8,56	C3 bifenil	0,047	774	C15H16	196
60,80	8,11	C4 bifenil	0,182	717	C16H18	210
62,80	8,21	C4 bifenil	0,081	766	C16H18	210
57,60	7,34	C4 bifenil	0,107	644	C16H18	210
71,80	8,51	C6 bifenil	0,116	797	C18H22	238
72,80	8,27	C6 bifenil	0,102	735	C18H22	238
73,40	8,54	C6 bifenil	1,336	836	C18H22	238
73,80	7,98	C6 bifenil	0,125	707	C18H22	238
94,00	14,59	C1 criseno	0,015	692	C19H14	242
47,60	9,14	fluoreno	0,199	910	C13H10	166
53,80	8,9	C1 fluoreno	0,358	912	C14H12	180
54,00	9,02	C1 fluoreno	0,540	896	C14H12	180
54,20	9,24	C1 fluoreno	0,864	905	C14H12	180
54,80	9,51	C1 fluoreno	0,413	854	C14H12	180
56,00	9,44	C1 fluoreno	0,094	878	C14H12	180
57,00	9,83	C1 fluoreno	0,088	896	C14H12	180
59,00	8,67	C2 fluoreno	0,041	815	C15H14	194
59,20	8,91	C2 fluoreno	0,100	806	C15H14	194
60,20	8,97	C2 fluoreno	0,282	870	C15H14	194
61,20	9,43	C2 fluoreno	0,233	865	C15H14	194
61,40	9,19	C2 fluoreno	0,025	770	C15H14	194
62,60	9,66	C2 fluoreno	0,127	832	C15H14	194
63,20	9,64	C2 fluoreno	0,077	782	C15H14	194
63,60	9,81	C2 fluoreno	0,196	795	C15H14	194
76,80	11,78	benzofluoreno	0,021	866	C17H12	216
79,00	12,46	benzofluoreno	0,073	876	C17H12	216
22,00	5,92	C1 indeno	0,027	890	C10H10	130

28,80	6,29	C2 indeno	0,049	668	C11H12	144
30,40	6,55	C2 indeno	0,031	717	C11H12	144
36,00	6,41	C3 indeno	0,026	742	C12H14	158
70,60	7,42	C3 indeno	0,016	720	C12H14	158
52,20	8,16	C5 indeno	0,092	670	C14H18	186
62,40	10,07	fenil indeno	0,024	720	C15H12	192
65,00	10,99	fenil indeno	0,985	827	C15H12	192
21,60	5,77	dihidro naftaleno	0,056	677	C10H10	130
16,20	3,59	decahidro naftaleno	0,015	684	C10H18	138
48,40	8,78	alil naftaleno	0,040	754	C13H12	168
48,60	8,83	alil naftaleno	0,076	794	C13H12	168
49,00	9,03	alil naftaleno	0,014	833	C13H12	168
46,60	7,76	C3 naftaleno	0,055	822	C13H14	170
46,80	7,85	C3 naftaleno	0,036	859	C13H14	170
48,00	8,19	C3 naftaleno	0,104	910	C13H14	170
49,00	8,35	C3 naftaleno	0,015	738	C13H14	170
46,80	6,91	C4 naftaleno	0,047	767	C14H16	184
47,80	7,15	C4 naftaleno	0,112	867	C14H16	184
52,60	7,57	C4 naftaleno	0,157	853	C14H16	184
53,40	7,88	C4 naftaleno	0,065	865	C14H16	184
53,60	7,96	C4 naftaleno	0,122	818	C14H16	184
54,60	7,98	C4 naftaleno	0,052	859	C14H16	184
55,80	8,46	C4 naftaleno	0,797	854	C14H16	184
52,20	7,14	C5 naftaleno	0,072	784	C15H18	198
52,40	6,83	C5 naftaleno	0,072	796	C15H18	198
53,00	7,25	C5 naftaleno	0,125	872	C15H18	198
53,40	7,11	C5 naftaleno	0,109	771	C15H18	198
53,60	6,98	C5 naftaleno	0,109	821	C15H18	198
54,40	7,21	C5 naftaleno	0,026	713	C15H18	198
54,80	7,08	C5 naftaleno	0,055	868	C15H18	198
55,60	7,43	C5 naftaleno	1,987	899	C15H18	198
58,20	7,69	C5 naftaleno	0,013	744	C15H18	198
60,20	8,21	C5 naftaleno	0,017	667	C15H18	198
62,40	8,21	C5 naftaleno	0,014	662	C15H18	198
63,40	8,54	C5 naftaleno	0,092	827	C15H18	198
55,60	6,6	C6 naftaleno	0,053	866	C16H20	212
58,20	7,26	C6 naftaleno	0,042	780	C16H20	212
60,80	7,25	C6 naftaleno	0,031	739	C16H20	212
64,40	7,19	C6 naftaleno	0,068	631	C16H20	212
70,40	7,12	C8 naftaleno	0,048	713	C18H24	240
70,60	7,04	C8 naftaleno	0,116	722	C18H24	240
72,60	9,41	C8 naftaleno	0,129	708	C18H24	240
67,40	10,88	fenil naftaleno	0,077	837	C16H12	204
65,80	9,06	C3 alil naftaleno	0,170	739	C16H18	210
67,60	9,58	C3 alil naftaleno	0,064	820	C16H18	210
81,40	10,9	C2 fenil naftaleno	0,864	785	C18H16	232
84,00	11,47	C2 fenil naftaleno	0,024	746	C18H16	232
73,80	13,26	fluoranteno	0,530	893	C16H10	202
71,60	12,25	pireno	0,226	922	C16H10	202

78,20	12,51	C1 pireno	0,262	857	C17H12	216
79,20	12,75	C1 pireno	0,208	920	C17H12	216
80,20	13,15	C1 pireno	0,435	914	C17H12	216
83,00	11,99	C2 pireno	0,032	826	C18H14	230
83,40	12,25	C2 pireno	0,053	808	C18H14	230
84,20	12,34	C2 pireno	0,060	794	C18H14	230
84,40	12,53	C2 pireno	0,080	835	C18H14	230
84,80	12,57	C2 pireno	0,036	728	C18H14	230
85,40	12,85	C2 pireno	0,016	738	C18H14	230
86,40	13,16	C2 pireno	0,067	877	C18H14	230
Hidrocarbonetos aromáticos			78,454	207 picos		
51,40	7,59	C6 acetofenona	0,149	785	C14H20O	204
54,20	8,39	fenil acetofenona	0,017	773	C14H12O	196
59,00	8,31	fenoxi acetofenona	0,023	695	C14H12O2	212
62,60	10,56	fenil acetofenona	0,022	768	C14H12O	196
65,60	7,27	C3 acetofenona	0,024	725	C11H14O	162
70,00	10,6	C1 antracenodiona	0,027	803	C15H10O2	222
45,00	8,07	C1 fenil hidroxi ciclopetenona	0,054	654	C12H12O2	188
47,40	8,39	C1 fenil hidroxi ciclopetenona	0,262	745	C12H12O2	188
50,20	8,55	C1 fenil hidroxi ciclopetenona	1,168	732	C12H12O2	188
74,00	9,29	C3 naftofurandiona	0,021	682	C15H12O3	240
46,40	7,75	C4 benzofuranona	0,157	816	C12H14O2	190
62,80	9,61	fenil indanona	0,184	766	C15H11O	207
64,40	9,36	fenil indanona	0,488	782	C15H12O	208
51,60	9,05	dihidro fenalenona	0,250	779	C14H20O	182
Cetonas			2,848	14 picos		
53,00	9,8	bifenildioli	0,136	680	C12H10O2	186
53,80	9,54	fluorenol	0,307	851	C13H10O	182
54,00	10,22	bifenildioli	0,028	678	C12H10O2	186
61,20	8,22	C2 fluorenol	0,186	777	C15H14O	210
62,60	8,77	C2 fluorenol	0,170	724	C15H14O	210
65,40	7,87	C2 fluorenol	0,031	731	C15H14O	210
66,00	7,97	C2 fluorenol	0,146	685	C15H14O	210
Fenóis			1,003	7 picos		
54,60	3,47	hidrocarboneto saturado	0,057	912	C16H34	226
58,20	3,53	hidrocarboneto saturado	0,044	857	C18H38	254
59,80	3,54	hidrocarboneto saturado	0,106	893	C20H42	282
60,20	3,38	hidrocarboneto saturado	0,014	628	C12H26	170
64,60	3,63	hidrocarboneto saturado	0,219	905	C20H42	282
68,00	3,66	hidrocarboneto saturado	0,044	838	C14H30	198
74,00	3,73	hidrocarboneto saturado	0,634	921	C27H56	380
77,00	3,79	hidrocarboneto saturado	0,062	869	C18H38	254
82,40	3,88	hidrocarboneto saturado	0,416	932	C27H56	380
86,40	3,93	hidrocarboneto saturado	0,075	898	C27H56	380
90,20	3,99	hidrocarboneto saturado	0,042	865	C27H56	380
93,80	4,08	hidrocarboneto saturado	0,027	912	C27H56	380
97,40	4,14	hidrocarboneto saturado	0,032	698	C19H40	268

53,60	3,7	hidrocarboneto insaturado	0,039	841	C18H36	252
54,20	3,65	hidrocarboneto insaturado	0,088	910	C18H36	252
54,80	3,69	hidrocarboneto insaturado	0,026	744	C14H28	196
59,40	3,72	hidrocarboneto insaturado	0,219	925	C18H36	252
60,00	3,76	hidrocarboneto insaturado	0,024	896	C18H36	252
60,60	3,82	hidrocarboneto insaturado	0,033	747	C18H36	252
63,80	3,83	hidrocarboneto insaturado	0,047	787	C21H42	294
64,40	3,78	hidrocarboneto insaturado	0,260	925	C18H36	252
64,80	3,84	hidrocarboneto insaturado	0,059	877	C18H36	252
65,60	3,87	hidrocarboneto insaturado	0,055	844	C18H36	252
68,60	3,89	hidrocarboneto insaturado	0,058	830	C16H32	224
69,00	3,86	hidrocarboneto insaturado	0,308	931	C20H40	280
69,60	3,89	hidrocarboneto insaturado	0,045	879	C18H36	252
70,20	3,95	hidrocarboneto insaturado	0,050	901	C18H36	252
73,00	3,96	hidrocarboneto insaturado	0,170	885	C18H36	252
73,60	3,92	hidrocarboneto insaturado	0,399	921	C18H36	252
74,80	4	hidrocarboneto insaturado	0,058	886	C20H40	280
75,80	3,92	hidrocarboneto insaturado	0,027	638	C13H26	182
77,40	4,02	hidrocarboneto insaturado	0,260	901	C20H40	280
78,00	3,98	hidrocarboneto insaturado	1,124	948	C22H44	308
78,40	4,02	hidrocarboneto insaturado	0,356	922	C22H44	308
79,00	4,08	hidrocarboneto insaturado	0,205	930	C22H44	308
81,40	4,06	hidrocarboneto insaturado	0,105	879	C20H40	280
82,00	4,08	hidrocarboneto insaturado	0,260	907	C22H44	308
82,40	4,1	hidrocarboneto insaturado	0,078	804	C18H36	252
83,20	4,13	hidrocarboneto insaturado	0,045	843	C22H44	308
86,00	4,13	hidrocarboneto insaturado	0,654	937	C22H44	308
86,40	4,17	hidrocarboneto insaturado	0,163	916	C22H44	308
87,20	4,2	hidrocarboneto insaturado	0,107	903	C22H44	308
Hidrocarbonetos alifáticos			7,094	42 picos		
Totais			100,000	318 picos		

A^a: área percentual calculada; PM^b: massa molecular do composto

Tabela 14: Identificação tentativa dos compostos da fração BOF3 do bio-óleo de serragem de madeira Lignocel (BO SE) por GCxGC/TOFMS.

¹ t _R (min)	² t _R (s)	Nome	Área (%) ^a	Similaridade	Fórmula	PM ^b
52,40	9,81	C1 naftaleno metanol	1,358	817	C12H12O	172
55,60	9,83	naftalenil propanol	0,200	747	C13H14O	186
57,80	9,59	naftalenil propanol	0,037	639	C13H14O	186
57,80	9,91	naftalenil propanol	0,489	791	C13H14O	186
55,00	4,78	álcool insaturado	0,283	825		
58,80	4,78	álcool insaturado	0,354	860		
64,00	4,80	álcool insaturado	0,292	797		
65,40	4,82	álcool insaturado	0,075	667		
70,20	4,86	álcool insaturado	0,081	668		
82,20	4,96	álcool insaturado	0,028	604		
Álcoois			3,197	10 picos		
60,00	10,56	fenoxi benzaldeído	0,194	636	C13H10O2	198
60,80	10,45	fenoxi benzaldeído	0,119	627	C13H10O2	198

66,80	10,18	metoxi fenoxi benzaldeído	2,705	690	C14H12O3	228
71,80	9,80	C1 metoxi fenoxi benzaldeído	3,343	662	C15H14O3	242
36,40	8,04	naftalenocarboxaldeído	0,041	674	C11H8O	156
37,20	8,16	naftalenocarboxaldeído	0,018	722	C11H8O	156
60,40	4,78	aldeído saturado	0,260	897		
63,40	4,96	aldeído saturado	0,072	700		
79,00	4,98	aldeído saturado	0,149	878		
83,20	5,02	aldeído saturado	0,338	905		
87,20	5,08	aldeído saturado	1,734	922		
90,00	5,10	aldeído saturado	0,134	698		
91,20	5,09	aldeído saturado	0,854	919		
94,80	5,18	aldeído saturado	0,964	920		
Aldeídos			10,926	14 picos		
47,40	8,39	C1 fenil hidroxí ciclopentenona	0,618	739	C12H12O2	188
50,20	8,55	C1 fenil hidroxí ciclopentenona	8,711	740	C12H12O2	188
51,20	9,31	C1 fenil hidroxí ciclopentenona	2,166	716	C12H12O2	188
45,00	8,05	C1 fenil hidroxí ciclopentenona	0,202	633	C12H12O2	188
79,20	10,30	C4 antracenediona	7,934	736	C18H16O2	264
84,20	11,07	C4 antracenediona	1,299	781	C18H16O2	264
64,00	10,22	C2 fluorenona	0,116	731	C15H12O	208
64,40	10,15	C2 fluorenona	0,220	665	C15H12O	208
66,40	10,30	C2 fluorenona	1,384	858	C15H12O	208
66,80	10,36	C2 fluorenona	0,514	791	C15H12O	208
67,60	10,81	C2 fluorenona	0,485	851	C15H12O	208
67,80	10,86	C2 fluorenona	2,622	779	C15H12O	208
52,40	7,68	C3 acetofenona	0,265	790	C14H20O	204
65,20	11,30	fenil acetofenona	0,759	769	C14H12O	196
57,20	11,97	C1 fenil ciclopentenona	0,182	649	C12H10O2	186
46,40	7,68	C4 benzofuranona	0,373	832	C12H14O2	190
47,60	7,96	C4 benzofuranona	0,220	714	C12H14O2	190
49,00	9,98	C4 indanona	0,494	721	C13H16O	188
54,80	9,69	C4 dihidro naftalenona	0,103	652	C14H18O	202
55,20	9,70	C4 dihidro naftalenona	0,123	634	C14H18O	202
55,60	9,41	C3 naftalenodiona	0,641	742	C13H12O2	200
63,60	9,58	C5 naftalenodiona	0,309	781	C15H16O2	228
64,20	9,61	C5 naftalenodiona	0,108	693	C15H16O2	228
65,20	9,87	C5 naftalenodiona	0,345	755	C15H16O2	228
45,40	9,51	acenaftilenona	0,220	725	C12H8O	168
48,20	6,98	C3 fenil propanona	0,097	670	C12H16O	176
52,60	6,64	C1 fenil hexanona	0,279	858	C13H18O	190
58,20	6,58	fenil heptanona	0,084	744	C13H18O	190
63,40	6,59	fenil octanona	0,061	763	C15H22O	218
58,20	4,60	cetona saturada	0,231	815		
63,20	4,66	cetona saturada	3,429	851		
72,60	4,73	cetona saturada	0,081	616		
Cetonas			34,674	32 picos		
25,20	5,98	C2 benzofurano	0,376	635	C10H10O	146
45,00	9,20	dibenzofurano	0,145	778	C12H8O	168
58,60	10,55	metoxi dibenzofurano	0,023	604	C13H10O2	198

61,00	11,25	metoxi dibenzofurano	2,433	791	C13H10O2	198
58,40	10,37	metoxi dibenzofurano	0,206	761	C13H10O2	198
67,40	11,54	C2 naftofurano	0,238	760	C14H12O	196
69,40	11,40	C2 naftofurano	0,858	810	C14H12O	196
70,00	11,81	C2 naftofurano	0,834	787	C14H12O	196
49,40	8,67	metoxi bifenil	0,268	749	C13H12O	184
62,00	10,03	C1 metoxi fenil benzeno	0,818	797	C14H14O	198
62,00	10,25	metoxi fluoreno	0,026	684	C14H12O	196
73,80	11,64	C2 xanteno	0,044	713	C15H14O	210
75,00	11,40	C2 xanteno	0,024	694	C15H14O	210
77,40	10,30	C2 metoxi benzopirano	0,032	680	C12H14O2	190
Éteres			6,324	14 picos		
50,00	8,93	C1 fenil fenol	0,232	804	C13H12O	184
64,40	11,82	hidroxi fluoreno	2,391	859	C13H10O	182
36,60	7,53	C1 naftol	0,156	685	C11H10O	158
53,40	10,35	C2 naftol	4,528	821	C12H12O	172
56,20	10,53	C2 naftol	0,155	737	C12H12O	172
56,00	9,97	C2 naftol	4,242	833	C12H12O	172
59,00	9,91	C3 naftol	3,919	851	C13H14O	186
60,20	9,67	C3 naftol	1,969	793	C13H14O	186
60,20	10,26	C3 naftol	1,727	848	C13H14O	186
60,60	10,21	C3 naftol	0,173	629	C13H14O	186
61,20	9,68	C3 naftol	0,157	812	C13H14O	186
62,20	9,89	C3 naftol	0,407	775	C13H14O	186
63,20	10,23	C3 naftol	0,277	798	C13H14O	186
64,40	10,66	C3 naftol	0,109	630	C13H14O	186
Fenóis			20,442	14 picos		
73,00	11,30	C2 antraceno	1,126	901	C16H14	206
6,20	14,31	tolueno	0,191	911	C7H8	92
8,00	14,89	C2 benzeno	5,661	961	C8H10	106
9,00	3,16	C2 benzeno	0,508	923	C8H10	106
11,60	3,52	C3 benzeno	0,343	924	C9H12	120
13,00	3,81	C3 benzeno	0,284	819	C9H12	120
14,40	4,24	C3 benzeno	0,029	619	C9H12	120
14,60	3,81	C4 benzeno	0,754	934	C10H14	134
43,20	7,67	C6 benzeno	0,092	667	C12H18	162
43,40	7,03	C6 benzeno	0,151	755	C12H18	162
51,20	7,51	C9 benzeno	0,726	721	C15H24	204
73,60	11,08	C4 bifenil	0,385	612	C16H18	210
22,00	5,93	C1 indeno	0,114	774	C10H10	130
28,40	6,19	C2 indeno	0,074	788	C11H12	144
28,80	6,29	C2 indeno	0,082	685	C11H12	144
73,60	9,23	C3 fenil indano	0,354	660	C18H20	236
54,80	8,75	C5 naftaleno	0,123	628	C15H18	198
55,60	7,40	C5 naftaleno	0,097	774	C15H18	198
56,80	9,04	C5 naftaleno	0,019	602	C15H18	198
62,60	9,88	C5 naftaleno	0,208	707	C15H18	198
65,20	9,73	C6 naftaleno	0,345	729	C16H20	212
81,40	10,86	C1 tolyl naftaleno	0,172	720	C18H16	232

30,40	6,53	C1 dihidro naftaleno	0,016	644	C11H12	144
16,20	3,59	decahidro naftaleno	0,338	875	C10H18	138
18,60	4,04	decahidro naftaleno	0,276	839	C10H18	138
65,20	11,03	C1 fenantreno/antraceno	0,045	878	C15H12	192
66,80	11,51	C1 fenantreno/antraceno	1,981	831	C15H12	192
70,80	10,84	C2 fenantreno/antraceno	0,119	644	C16H14	206
75,60	10,49	C3 fenantreno/antraceno	0,089	669	C17H16	220
78,20	10,92	C3 fenantreno/antraceno	0,352	829	C17H16	220
78,40	9,89	C4 fenantreno/antraceno	1,718	853	C18H18	234
79,60	10,26	C4 fenantreno/antraceno	0,156	805	C18H18	234
82,60	10,63	C4 fenantreno/antraceno	0,310	686	C18H18	234
84,20	9,92	C5 fenantreno/antraceno	0,136	700	C19H20	248
85,00	10,19	C5 fenantreno/antraceno	5,299	856	C19H20	248
57,80	4,87	hidrocarboneto insaturado	0,205	761		
78,00	3,97	hidrocarboneto insaturado	0,167	840		
80,20	5,23	hidrocarboneto insaturado	0,112	658		
91,60	4,94	hidrocarboneto insaturado	0,209	900		
98,80	5,05	hidrocarboneto insaturado	0,230	779		
59,80	3,53	hidrocarboneto saturado	0,108	723		
64,60	3,62	hidrocarboneto saturado	0,205	883		
69,40	3,68	hidrocarboneto saturado	0,106	886		
74,00	3,73	hidrocarboneto saturado	0,169	878		
78,20	3,81	hidrocarboneto saturado	0,119	924		
82,40	3,87	hidrocarboneto saturado	0,134	881		
Hidrocarbonetos			24,437	46 picos		
Totais			100,000	130 picos		

A^a: área percentual calculada; PM^b: massa molecular do composto

Tabela 15: Identificação tentativa dos compostos da fração BOF4 do bio-óleo de serragem de madeira lignocel (BO SE) por GC×GC/TOFMS.

¹ t _R (min)	² t _R (s)	Nome	Área (%) ^a	Similaridade	Fórmula	PM ^b
39,00	9,18	C1 hidroxí benzaldeído	0,705	782	C8H8O2	136
39,20	9,06	C1 hidroxí benzaldeído	0,270	863	C8H8O2	136
44,00	8,85	C2 hidroxí benzaldeído	0,111	614	C9H10O2	150
34,20	6,96	C2 benzaldeído	0,157	782	C9H10O	134
35,00	7,46	C3 benzaldeído	0,179	811	C10H12O	148
36,40	7,46	C3 benzaldeído	0,486	854	C10H12O	148
45,00	7,67	C5 benzaldeído	0,511	756	C12H16O	176
45,60	7,59	C5 benzaldeído	0,168	743	C12H16O	176
46,60	8,35	C5 benzaldeído	0,345	740	C12H16O	176
47,00	8,70	C5 benzaldeído	0,309	746	C12H16O	176
48,00	8,44	C5 benzaldeído	0,186	698	C12H16O	176
48,20	8,61	C5 benzaldeído	0,114	774	C12H16O	176
50,20	8,03	C5 benzaldeído	0,076	720	C12H16O	176
61,20	10,28	fenoxi benzaldeído	0,067	748	C13H10O2	198
62,20	10,24	fenoxi benzaldeído	0,745	780	C13H10O2	198
66,80	11,25	fenoxi benzaldeído	0,042	780	C13H10O2	198
67,40	11,80	fenoxi benzaldeído	0,032	792	C13H10O2	198

37,40	7,47	hidroxi alil benzaldeído	0,108	720	C10H10O2	162
33,20	9,38	benzenoacetaldeído C2 metoxi	0,021	799	C8H8O	120
42,00	6,08	benzenoacetaldeído	0,045	754	C11H14O2	178
44,40	7,26	C3 benzenoacetaldeído	0,138	780	C11H14O	162
33,40	8,44	C2 alil benzenoacetaldeído	0,067	750	C10H10O	146
41,60	9,10	C1 benzenodicarboxaldeído	0,390	751	C9H8O2	148
43,20	8,55	C2 benzenodicarboxaldeído	0,995	827	C10H10O2	162
41,40	8,34	C2 benzenodicarboxaldeído	0,357	797	C10H10O2	162
42,40	8,47	C2 benzenodicarboxaldeído	0,785	822	C10H10O2	162
45,60	8,72	C2 benzenodicarboxaldeído	0,073	683	C10H10O2	162
47,80	9,08	C2 benzenodicarboxaldeído	0,027	766	C10H10O2	162
53,60	10,16	bifenilcarboxaldeído	0,187	726	C13H10O	182
49,60	6,58	C2 benzenobutanal	0,047	790	C12H16O	176
46,60	8,44	fenil propenal	0,185	689	C9H8O	132
47,40	8,47	indeno carboxaldeído dihidro	0,158	744	C10H10O	146
43,00	10,48	naftalenocarboxaldeído	0,475	932	C11H8O	156
49,40	10,08	C1 naftalenocarboxaldeído	0,096	886	C12H10O	170
51,40	10,85	C1 naftalenocarboxaldeído	0,016	840	C12H10O	170
30,20	7,39	C1 fenil propenal	0,043	865	C10H10O	146
33,80	7,87	C1 fenil propenal	0,023	824	C10H10O	146
35,20	8,65	C1 fenil propenal C1 dihidro	0,077	846	C10H10O	146
39,00	7,63	benzofuranocarboxaldeído C1	0,341	743	C10H10O2	162
36,00	8,73	benzofuranocarboxaldeído	0,042	771	C10H8O2	160
Aldeídos			9,199	40 picos		
40,60	8,78	C1 ácido cinâmico	0,419	777	C10H10O2	162
44,00	8,37	C1 ácido cinâmico	0,500	761	C10H10O2	162
49,80	8,51	C2 ácido cinâmico	0,237	684	C11H12O2	176
Ácidos carboxílicos			1,156	3 picos		
41,00	6,62	C3 benzenometanol	0,067	707	C10H14O	150
42,40	6,67	C3 benzenometanol	0,018	724	C10H14O	150
48,00	9,18	C9 benzenometanol	0,030	695	C16H26O	234
52,40	9,82	C1 naftalenometanol	0,212	794	C12H12O	172
60,80	10,42	naftalenopropanol	0,043	747	C13H14O	186
43,60	9,13	naftalenodimetanol	0,027	725	C12H12O2	188
Álcoois			0,397	6 picos		
6,40	14,58	pentanona	0,021	727	C5H10O	86
7,40	3,05	hidroxi hexanona	0,024	909	C6H12O2	116
41,40	8,49	fenil butenona	0,024	770	C10H10O	146
44,80	8,39	fenil butenona	0,101	676	C10H10O	146
29,00	6,79	C1 fenil propenona	0,046	895	C10H12O	148
29,80	6,94	C1 fenil propenona	0,036	906	C10H12O	148
38,60	6,68	C2 fenil propenona	0,046	815	C11H14O	162
47,80	7,61	C3 fenil propenona	0,107	778	C12H16O	176
47,60	6,77	C1 fenil pentanona	0,015	889	C12H16O	176
44,00	9,61	metoxi fenil propenona	0,288	830	C10H12O2	164
31,20	7,60	fenil butenona	0,043	662	C10H10O	146
86,20	14,36	bifenil butenona	0,025	742	C16H14O	222

34,40	6,80	fenil butanona	0,168	728	C10H12O	148
40,60	6,79	fenil pentanona	0,100	931	C11H14O	162
34,20	7,24	C2 acetofenona	0,073	835	C10H12O	148
35,40	6,82	C2 acetofenona	0,147	842	C10H12O	148
43,20	7,11	C2 acetofenona	0,202	808	C10H12O	148
37,00	7,41	C3 acetofenona	0,040	800	C11H14O	162
40,40	8,39	C3 acetofenona	0,264	818	C11H14O	162
43,20	8,15	C3 acetofenona	0,021	719	C11H14O	162
40,40	7,55	C3 acetofenona	0,050	842	C11H14O	162
41,40	7,74	C3 acetofenona	0,281	811	C11H14O	162
43,40	7,99	C4 acetofenona	0,051	750	C12H16O	176
44,00	7,64	C4 acetofenona	0,046	758	C12H16O	176
47,20	8,27	hidroxi alil acetofenona	0,064	759	C11H12O2	176
47,60	8,30	hidroxi alil acetofenona	0,148	808	C11H12O2	176
48,00	8,35	hidroxi alil acetofenona	0,333	796	C11H12O2	176
48,60	8,65	hidroxi alil acetofenona	0,251	799	C11H12O2	176
49,00	8,31	hidroxi alil acetofenona	0,400	781	C11H12O2	176
50,00	8,23	hidroxi alil acetofenona	0,281	816	C11H12O2	176
64,00	11,02	fenil acetofenona	0,121	779	C14H12O	196
65,20	11,29	fenil acetofenona	0,077	790	C14H12O	196
65,80	11,28	fenil acetofenona	0,067	810	C14H12O	196
66,20	11,56	fenil acetofenona	0,218	757	C14H12O	196
34,40	7,70	vinil acetofenona	0,071	830	C10H10O	146
45,40	9,52	acenaftilenona	0,019	775	C12H8O	168
56,80	10,20	acenafteno	0,063	675	C14H12O	196
47,40	10,47	acetonaftone	0,123	897	C12H10O	170
53,00	9,58	C1 acetonaftone	0,017	712	C13H12O	184
53,60	10,04	C1 acetonaftone	0,140	704	C13H12O	184
58,60	10,82	C1 acetonaftone	0,040	791	C13H12O	184
68,80	11,29	C2 acetonaftone	0,069	781	C14H12O	196
69,00	11,35	C2 acetonaftone	0,058	763	C14H12O	196
62,80	10,80	antracenona	0,090	857	C14H10O	194
63,40	11,50	antracenona	0,140	870	C14H10O	194
69,20	8,65	C3 antracenodiona	0,043	584	C17H14O2	250
84,20	11,05	C4 antracenodiona	0,032	758	C18H16O2	264
50,20	9,99	Benzofenona	0,177	775	C13H10O	182
43,00	7,98	C1 fenil ciclopentenona	0,134	795	C12H12O	172
45,00	8,26	C1 fenil ciclopentenona	0,226	795	C12H12O	172
55,80	11,25	fluorenona	1,010	925	C13H8O	180
66,80	10,35	C2 fluorenona	0,090	684	C15H12O	208
68,00	10,64	C2 fluorenona	0,035	797	C15H12O	208
68,60	10,69	C2 fluorenona	0,029	755	C15H12O	208
81,00	14,02	C3 fluorenona	0,199	683	C16H12O	208
44,60	8,38	C2 hidroxi benzofuranona	0,196	710	C10H10O3	178
31,60	7,88	benzofuranona	0,212	792	C8H6O2	134
38,80	8,91	C2 benzofuranona	0,125	827	C10H10O2	162
39,80	7,36	C2 benzofuranona	0,014	764	C10H10O2	162
42,80	7,50	C2 benzofuranona	0,211	790	C10H10O2	162
43,20	8,46	C2 benzofuranona	1,759	625	C10H10O2	162

43,20	7,55	C3 benzofuranona	0,026	830	C11H12O2	176
43,80	7,52	C3 benzofuranona	0,081	808	C11H12O2	176
44,80	7,46	C3 benzofuranona	0,057	813	C11H12O2	176
49,40	7,46	C4 benzofuranona	0,028	851	C12H14O2	190
49,60	7,62	C4 benzofuranona	0,078	836	C12H14O2	190
50,80	8,07	C4 benzofuranona	0,056	754	C12H14O2	190
52,40	8,47	C4 benzofuranona	0,031	644	C12H14O2	190
53,80	8,82	C4 benzofuranona	0,055	701	C12H14O2	190
49,60	11,75	naftofuranona	0,278	867	C11H6O2	170
48,20	9,17	C1 hidroxí indanona	0,018	592	C10H10O2	162
38,20	9,06	indanona	0,067	620	C9H8O	132
35,20	7,96	C2 indanona	0,208	831	C11H12O	160
36,40	7,38	C2 indanona	0,364	772	C11H12O	160
39,00	7,60	C2 indanona	0,413	811	C11H12O	160
40,20	7,74	C2 indanona	0,130	714	C11H12O	160
42,00	8,37	C2 indanona	0,120	678	C11H12O	160
42,80	8,45	C2 indanona	0,020	731	C11H12O	160
42,00	8,61	C3 indanona	0,035	725	C12H14O	174
42,80	7,98	C3 indanona	0,322	604	C12H14O	174
45,00	8,79	C3 indanona	0,205	713	C12H14O	174
47,40	8,12	C3 indanona	0,228	791	C12H14O	174
48,20	8,20	C4 indanona	0,077	695	C13H16O	188
55,60	8,40	C4 indanona	0,038	648	C13H16O	188
45,60	8,82	C2 indanodiona	0,113	801	C11H10O2	174
33,20	9,50	indenodiona	0,148	929	C9H6O2	146
38,00	8,81	C1 dihidro naftalenona	0,051	760	C11H12O	160
39,20	6,31	C1 hexahidro naftalenona	0,137	744	C11H16O	164
39,40	7,76	C2 dihidro naftalenona	0,087	843	C12H14O	174
50,40	10,05	C2 naftalenodiona	0,139	834	C12H10O2	186
35,60	6,29	C2 dihidro benzopiranona	0,028	668	C11H12O2	176
57,20	11,54	naftopiranona	0,088	721	C12H8O2	184
Cetonas			13,227	92 picos		
35,60	8,98	bifurano	0,053	776	C8H6O2	134
36,80	8,59	C1 hidroxí benzofurano	0,777	816	C9H8O2	148
37,00	8,38	C1 hidroxí benzofurano	0,692	764	C9H8O2	148
37,60	8,26	C1 hidroxí benzofurano	0,482	864	C9H8O2	148
35,00	8,16	C1 hidroxí benzofurano	0,424	810	C9H8O2	148
41,40	7,90	C4 hidroxí benzofurano	0,024	609	C12H16O	176
51,60	9,37	C4 metoxi benzofurano	0,025	677	C11H12O2	176
40,00	8,36	C2 benzofurano	0,057	684	C10H10O	146
35,80	7,87	C2 benzofurano	0,054	769	C10H10O	146
43,60	9,82	C4 benzofurano	0,757	691	C12H14O	174
67,40	11,57	C2 naftofurano	0,156	802	C14H12O	196
35,80	6,25	C4 metoxi benzeno	0,123	779	C11H16O	164
37,20	6,18	C4 metoxi benzeno	0,282	818	C11H16O	164
39,40	6,54	C4 metoxi benzeno	0,133	804	C11H16O	164
38,40	6,48	C4 metoxi benzeno	0,050	812	C11H16O	164
39,40	6,63	C4 metoxi benzeno	0,095	696	C11H16O	164
35,00	6,04	C3 etoxi benzeno	0,032	827	C11H16O	164

64,40	9,84	C1 fenil metoxi benzeno	0,033	747	C14H14O	198
64,40	10,21	C1 fenil metoxi benzeno	0,398	813	C14H14O	198
65,00	10,00	C1 fenil metoxi benzeno	0,038	805	C14H14O	198
42,40	6,27	C2 dimetoxi benzeno	0,016	804	C10H14O2	166
35,80	6,10	C2 dimetoxi benzeno	0,178	816	C10H14O2	166
67,20	10,49	metoxi antraceno	0,026	814	C15H12O	208
49,20	8,79	metoxi bifenil	0,078	802	C13H12O	184
45,80	8,42	metoxi tetrahydro naftaleno	0,219	721	C11H14O	162
47,40	8,96	metoxi tetrahydro naftaleno	0,130	817	C11H14O	162
45,40	8,47	metoxi dihidro naftaleno	1,572	823	C11H12O	160
46,40	9,02	metoxi dihidro naftaleno	0,231	781	C11H12O	160
44,00	8,29	metoxi dihidro naftaleno	2,046	755	C11H12O	160
37,40	8,73	metoxi naftaleno	0,053	799	C11H10O	158
40,00	9,47	metoxi naftaleno	0,027	821	C11H10O	158
69,80	11,07	C2 xanteno	0,046	789	C15H14O	210
71,60	11,63	C2 xanteno	0,033	770	C15H14O	210
72,20	11,87	C2 xanteno	0,033	682	C15H14O	210
72,80	11,33	C2 xanteno	0,087	741	C15H14O	210
75,40	11,51	C2 xanteno	0,068	729	C15H14O	210
45,80	6,93	C2 dihidro benzopirano	0,032	663	C11H14O	162
46,40	7,68	C2 dihidro benzopirano	0,015	732	C12H14O2	190
51,40	8,26	C2 dihidro benzopirano	0,049	688	C12H14O2	190
50,80	10,83	naftopirano	0,017	745	C12H10O	170
Éteres			9,643	40 picos		
23,00	5,81	C2 fenol	0,027	833	C8H10O	122
27,00	6,20	C3 fenol	0,413	906	C9H12O	136
28,40	6,14	C3 fenol	0,756	893	C9H12O	136
28,40	6,26	C3 fenol	0,187	904	C9H12O	136
28,80	6,48	C3 fenol	0,194	931	C9H12O	136
29,20	6,44	C3 fenol	0,052	897	C9H12O	136
29,60	6,56	C3 fenol	0,076	868	C9H12O	136
31,00	6,99	C3 fenol	0,563	906	C9H12O	136
38,80	6,41	C4 fenol	0,188	804	C10H14O	150
30,80	6,11	C4 fenol	0,173	869	C10H14O	150
31,60	6,06	C4 fenol	0,032	858	C10H14O	150
31,80	6,02	C4 fenol	0,059	879	C10H14O	150
31,80	6,20	C4 fenol	0,410	834	C10H14O	150
32,00	6,10	C4 fenol	0,053	874	C10H14O	150
32,60	6,34	C4 fenol	2,439	904	C10H14O	150
33,80	6,46	C4 fenol	0,368	678	C10H14O	150
33,80	6,49	C4 fenol	0,366	855	C10H14O	150
34,00	6,25	C4 fenol	0,162	829	C10H14O	150
34,00	6,54	C4 fenol	0,374	843	C10H14O	150
34,60	6,35	C4 fenol	0,028	882	C10H14O	150
34,60	7,05	C4 fenol	0,023	777	C10H14O	150
35,00	6,53	C4 fenol	0,098	836	C10H14O	150
35,00	6,60	C4 fenol	0,102	793	C10H14O	150
36,20	7,07	C4 fenol	0,481	825	C10H14O	150
36,60	6,18	C4 fenol	0,102	736	C10H16O	150

37,20	7,09	C4 fenol	0,023	715	C10H14O	150
38,80	7,42	C4 fenol	0,168	882	C10H14O	150
38,80	6,47	C5 fenol	0,188	764	C11H16O	164
40,80	6,40	C5 fenol	0,055	826	C11H16O	164
59,40	10,79	C1 dihidro acenaftilenol	0,016	768	C13H12O	184
58,20	11,74	acenaftenol	0,113	851	C12H10O	170
28,20	6,49	alil fenol	0,218	872	C9H10O	134
30,20	6,82	alil fenol	0,173	847	C9H10O	134
31,00	6,86	alil fenol	0,704	899	C9H10O	134
31,80	6,99	alil fenol	0,840	876	C9H10O	134
33,60	7,27	alil fenol	1,127	882	C9H10O	134
32,40	6,81	C1 alil fenol	2,546	895	C10H12O	148
34,40	7,34	C1 alil fenol	0,182	845	C10H12O	148
35,80	7,19	C1 alil fenol	2,535	902	C10H12O	148
36,00	7,89	C1 alil fenol	0,023	801	C10H12O	148
36,20	7,24	C1 alil fenol	0,031	822	C10H12O	148
38,20	7,97	C1 alil fenol	6,309	867	C10H12O	148
38,60	8,12	C1 alil fenol	0,246	845	C10H12O	148
39,00	8,12	C1 alil fenol	2,419	862	C10H12O	148
33,40	7,79	indanol	0,249	936	C9H10O	134
34,20	6,81	indanol	2,206	709	C9H10O	134
44,20	8,51	C2 indanol	0,049	696	C11H14O	162
34,40	8,42	indenol	0,052	890	C9H8O	132
37,40	8,03	indenol	0,031	784	C9H8O	132
40,60	8,73	indenol	0,622	872	C9H8O	132
54,80	10,56	hidroxi bifenil	0,346	869	C12H10O	170
49,80	9,89	hidroxi bifenil	0,105	837	C12H10O	170
50,20	10,08	hidroxi bifenil	0,200	850	C12H10O	170
54,40	10,18	hidroxi bifenil	0,405	935	C12H10O	170
49,80	8,99	C1 fenil fenol	0,192	891	C13H12O	184
53,60	9,62	C1 fenil fenol	0,148	779	C13H12O	184
58,80	10,36	C1 fenil fenol	2,267	883	C13H12O	184
59,00	10,91	C1 fenil fenol	0,032	732	C13H12O	184
60,20	10,24	C1 fenil fenol	0,483	814	C13H12O	184
61,60	11,08	dibenzofuranol	0,181	833	C12H8O2	184
62,80	11,31	dibenzofuranol	0,029	737	C12H8O2	184
63,60	11,79	hidroxi fluoreno	0,480	885	C13H10O	182
64,40	11,87	hidroxi fluoreno	0,602	859	C13H10O	182
65,00	11,91	hidroxi fluoreno	0,238	883	C13H10O	182
43,60	9,74	naftol	0,725	910	C10H8O	144
44,20	9,81	naftol	0,742	950	C10H8O	144
49,40	9,76	C1 naftol	0,130	875	C11H10O	158
49,60	10,61	C1 naftol	7,193	888	C11H10O	158
51,00	10,43	C1 naftol	4,396	843	C11H10O	158
51,20	9,29	C1 naftol	0,025	726	C11H10O	158
51,20	10,13	C1 naftol	0,531	841	C11H10O	158
53,60	10,20	C2 naftol	0,107	801	C12H12O	172
55,20	10,08	C2 naftol	3,899	860	C12H12O	172
56,00	10,03	C2 naftol	1,147	864	C12H12O	172

56,20	10,59	C2 naftol	0,676	825	C12H12O	172
56,60	10,66	C2 naftol	0,978	848	C12H12O	172
57,60	10,55	C2 naftol	0,699	855	C12H12O	172
58,40	10,60	C2 naftol	0,393	841	C12H12O	172
59,20	9,90	C3 naftol	0,075	771	C13H14O	186
59,80	9,74	C3 naftol	0,151	789	C13H14O	186
60,20	9,74	C3 naftol	0,114	808	C13H14O	186
60,40	9,88	C3 naftol	0,121	822	C13H14O	186
61,20	9,75	C3 naftol	0,210	812	C13H14O	186
62,20	9,93	C3 naftol	0,217	815	C13H14O	186
62,40	10,24	C3 naftol	0,235	863	C13H14O	186
63,20	10,25	C3 naftol	0,114	822	C13H14O	186
64,40	10,77	C3 naftol	0,158	838	C13H14O	186
65,60	10,95	C3 naftol	0,024	821	C13H14O	186
47,00	8,44	dihidro naftol	0,132	763	C10H10O	146
40,00	8,58	tetrahidro naftol	1,134	840	C10H12O	148
40,80	9,10	tetrahidro naftalenodiol	0,123	817	C10H12O2	164
52,00	10,28	metoxi naftol	0,015	773	C11H10O2	174
89,20	4,74	hidroxi pireno metoxi propenil fenol	0,017	817	C16H10O	218
54,80	8,21	(eugenol)	0,039	792	C10H12O2	164
45,60	7,67	C2 metoxi fenol	0,104	755	C9H12O2	152
62,00	10,93	fenantrenol	0,157	868	C14H10O	194
70,80	11,67	C2 fluorenol	0,060	728	C15H14O	210
Fenol			59,397	97 picos		
6,20	14,30	tolueno	0,018	930	C7H8	92
13,00	3,81	C3 benzeno	0,017	881	C9H12	120
14,60	3,80	C4 benzeno	0,066	938	C10H14	134
41,00	7,38	C6 benzeno	0,649	832	C12H18	162
41,80	7,62	C6 benzeno	0,191	832	C12H18	162
43,00	7,79	C6 benzeno	1,404	849	C12H18	162
44,80	8,29	C6 benzeno	0,122	632	C12H18	162
47,40	7,82	C7 benzeno	0,026	746	C13H20	176
53,80	8,27	C8 benzeno	0,095	722	C14H22	190
72,80	11,42	C2 bifenil	0,228	696	C16H18	210
73,20	11,18	C2 bifenil	0,125	779	C16H18	210
58,60	10,77	antraceno/fenantreno	0,041	769	C14H10	178
73,00	11,31	C2 antraceno/fenantreno	0,142	876	C16H14	206
66,80	11,54	C1 antraceno/fenantreno	0,053	891	C15H12	192
72,40	11,05	C2 antraceno/fenantreno	0,077	816	C16H14	206
78,20	10,93	C3 antraceno/fenantreno	0,093	817	C17H16	220
78,40	9,90	C4 antraceno/fenantreno	0,068	894	C18H18	234
79,60	10,26	C4 antraceno/fenantreno	0,040	834	C18H18	234
82,60	10,66	C4 antraceno/fenantreno	0,151	721	C18H18	234
84,60	9,89	C5 antraceno/fenantreno	0,015	831	C19H20	248
85,00	10,21	C5 antraceno/fenantreno	0,484	839	C19H20	248
35,60	9,21	indeno	0,048	818	C9H8	116
36,20	9,63	indeno	0,074	826	C9H8	116
22,00	5,93	C1 indeno	0,027	841	C10H10	130

28,40	6,21	C2 indeno	0,620	794	C11H12	144
51,20	8,55	C5 indeno	0,142	659	C14H18	186
51,20	8,19	C3 indeno	0,061	620	C12H16	160
52,00	8,50	C4 indeno	0,100	739	C13H18	174
16,20	3,59	decahidro naftaleno	0,016	843	C10H18	138
38,80	8,67	dihidro naftaleno	1,239	824	C10H10	130
42,00	9,15	dihidro naftaleno	0,131	759	C10H10	130
50,80	8,36	C3 tetrahidro naftaleno	0,055	660	C13H18	174
59,00	9,61	C5 naftaleno	0,326	767	C15H18	198
81,40	10,87	C2 fenil naftaleno	0,037	778	C18H16	232
Hidrocarbonetos			6,981	33 picos		
Totais			100,000	311 picos		

A^a: área percentual calculada; PM^b: massa molecular do composto

Tabela 16: Identificação tentativa dos compostos da fração BOF5 do bio-óleo de serragem de madeira lignocel (BO SE) por GCxGC/TOFMS.

¹ t _R (min)	² t _R (s)	Nome	Área (%) ^a	Similaridade	Fórmula	PM ^b
27,40	6,31	C1 ácido benzóico	0,019	895	C8H8O2	136
28,80	6,65	C1 ácido benzóico	0,046	880	C8H8O2	136
42,00	7,87	C2 ácido benzóico	1,246	732	C9H10O2	150
45,00	8,18	C2 ácido benzóico	0,423	731	C9H10O2	150
45,20	9,18	C2 ácido benzóico	0,625	778	C9H10O2	150
47,80	8,76	C3 ácido benzóico	0,102	714	C10H12O2	164
47,00	9,48	metoxi hidroxi ácido benzóico	0,015	774	C8H8O4	168
45,20	6,98	ácido dihidroxi acéticobenzeno	0,038	805	C8H8O4	168
51,40	9,61	ácido metoxi hidroxi acéticobenzeno	0,021	758	C9H10O4	182
6,20	2,45	ácido butenóico	0,019	835	C4H6O2	86
6,80	2,92	ácido butenóico	0,032	921	C4H6O2	86
9,80	3,73	ácido pentenóico	0,048	904	C5H8O2	100
22,80	4,51	ácido octenóico	0,035	781	C8H14O2	142
7,40	2,61	ácido pentanóico	0,025	797	C5H10O2	102
8,40	2,89	C1 ácido butanóico	0,023	829	C5H10O2	102
12,00	3,45	ácido hexanóico	0,018	840	C6H12O2	116
12,20	3,61	C1 ácido pentanóico	0,045	901	C6H12O2	116
17,20	4,06	ácido heptanóico	0,015	944	C7H14O2	130
23,20	4,31	ácido octanóico	0,044	931	C8H16O2	144
29,40	4,39	ácido nonanóico	0,037	875	C9H18O2	158
40,80	8,06	C1 ácido cinamico	0,031	793	C10H10O2	162
41,80	8,28	C1 ácido cinamico	0,058	717	C10H10O2	162
43,00	8,3	C1 ácido cinamico	0,077	788	C10H10O2	162
Ácido carboxílico			3,042	23 picos		
12,80	7,52	propenol	0,007	909	C3H6O	58
13,40	6,12	octanol	0,062	747	C8H18O	130
6,80	3,34	heptadienodiol	0,180	754	C7H12O2	128
43,00	8,82	C3 benzenometanol	0,063	659	C10H14O	150
36,40	7,8	C1 hidroxi benzenometanol	0,278	691	C8H10O2	138

49,40	9,37	metoxi benzenopropanol	0,080	801	C10H14O2	166
		Álcoois	0,671	6 picos		
11,40	5,05	benzaldeído	0,008	707	C7H6O	106
17,40	6,23	C1 benzaldeído	0,012	816	C8H8O	120
34,60	10,38	C3 benzaldeído	0,060	757	C10H12O	148
45,00	7,68	C5 benzaldeído	0,044	783	C12H16O	176
47,00	11,07	C5 benzaldeído	0,085	682	C12H16O	176
24,40	7,89	metoxi benzaldeído	0,046	921	C8H8O2	136
27,20	8,07	metoxi benzaldeído	0,091	908	C8H8O2	136
30,80	8,17	C1 metoxi benzaldeído	0,064	864	C9H10O2	150
41,20	9,6	C2 metoxi benzaldeído	0,079	680	C9H10O2	150
31,80	8,23	hidroxi benzaldeído	0,276	925	C7H6O2	122
35,40	8,69	hidroxi benzaldeído	0,206	965	C7H6O2	122
21,80	6,54	C1 hidroxi benzaldeído	0,110	880	C8H8O2	136
24,80	7,57	C1 hidroxi benzaldeído	0,009	771	C8H8O2	136
29,00	8,36	C1 hidroxi benzaldeído	0,083	773	C8H8O2	136
35,60	8,84	C1 hidroxi benzaldeído	0,017	872	C8H8O2	136
38,00	8,68	C1 hidroxi benzaldeído	0,024	764	C8H8O2	136
39,40	9,11	C1 hidroxi benzaldeído	0,941	915	C8H8O2	136
40,40	7,7	C1 hidroxi benzaldeído	0,276	716	C8H8O2	136
48,40	9,02	C2 hidroxi benzaldeído	0,049	778	C9H10O2	150
22,40	7,02	Dihidroxi benzaldeído	0,056	807	C7H6O3	138
28,60	7,48	C1 benzenodicarboxaldeído	0,122	798	C9H8O2	148
32,00	7,38	C1 benzenodicarboxaldeído	0,126	795	C9H8O2	148
34,20	7,98	C1 benzenodicarboxaldeído	0,261	832	C9H8O2	148
40,00	7,79	C2 benzenodicarboxaldeído	0,030	757	C10H10O2	162
40,40	8,04	C2 benzenodicarboxaldeído	0,023	788	C10H10O2	162
40,60	8,01	C2 benzenodicarboxaldeído	0,038	761	C10H10O2	162
41,00	8,63	C2 benzenodicarboxaldeído	0,157	750	C10H10O2	162
42,40	8,46	C2 benzenodicarboxaldeído	0,014	784	C10H10O2	162
43,00	8,22	C1 naftalenocarboxaldeído	0,070	699	C12H10O	170
32,60	9,78	etoxi benzaldeído	0,007	680	C9H10O2	150
63,00	10,24	fenoxi benzaldeído	0,070	766	C13H10O2	198
29,00	9,02	benzenoacetaldeído	0,135	882	C8H8O	120
29,00	8,46	cinamoaldeído	0,073	872	C9H8O	132
37,00	10,04	vanilina	1,736	961	C8H8O3	152
19,40	7,57	hexadienal	0,015	816	C6H8O	96
21,80	7,47	fenil propenal	0,016	836	C9H8O	132
19,00	7,1	furanil propenal	0,063	692	C7H6O2	122
21,00	9,25	furanil propenal	0,076	800	C7H6O2	122
21,40	9,01	furanil propenal	0,043	830	C7H6O2	122
25,40	10,04	furanil propenal	0,033	800	C7H6O2	122
25,60	9,88	furanil propenal	0,078	816	C7H6O2	122
6,60	3,27	furfural	0,020	953	C5H4O2	96
7,00	3,61	furfural	0,284	952	C5H4O2	96
26,80	9,28	C1 hidroxi furfural	0,193	808	C6H6O3	126
9,80	4,37	C1 furfural	0,217	867	C6H6O2	110
11,60	5,22	C1 furfural	3,027	757	C6H6O2	110
14,60	5,44	C2 furfural	0,006	754	C7H8O2	124

16,00	5,95	C2 furfural	0,068	943	C7H8O2	124
39,00	9,06	C1 benzofurfural	0,089	857	C10H8O2	160
17,00	8,57	furanodiol	0,112	887	C6H4O3	124
17,60	6,29	furanodiol	0,071	731	C6H4O3	124
Aldeídos			9,807	51 picos		
11,00	5,43	C1 hexenona	0,027	776	C7H12O	112
17,00	8,22	heptenona	0,095	839	C7H12O	112
21,60	9,16	heptenona	0,025	849	C7H12O	112
20,60	7,75	octadienona	0,064	792	C8H12O	124
22,20	8,45	octenone	0,028	733	C8H14O	126
15,00	7,33	nonanona	0,111	780	C9H18O	142
15,60	7,03	nonanona	0,094	799	C9H18O	142
26,60	6,93	nonadienona	0,016	667	C8H12O	124
26,00	7,13	C1 fenil acetona	0,034	853	C10H12O	148
16,40	6,37	acetofenona	0,171	963	C8H8O	120
20,60	6,47	C1 acetofenona	0,010	864	C9H10O	134
22,80	6,86	C1 acetofenona	0,163	930	C9H10O	134
23,60	6,94	C1 acetofenona	0,094	897	C9H10O	134
28,40	7,01	C2 acetofenona	0,010	789	C10H12O	148
29,40	6,96	C2 acetofenona	0,014	785	C10H12O	148
29,80	7,05	C2 acetofenona	0,016	854	C10H12O	148
32,00	7,45	C2 acetofenona	0,070	920	C10H12O	148
37,00	7,42	C3 acetofenona	0,012	739	C11H14O	162
40,00	8,01	C3 acetofenona	0,279	694	C11H14O	162
32,00	6,69	C3 acetofenona	0,010	760	C11H14O	162
39,00	7,94	C3 acetofenona	0,079	820	C11H14O	162
39,60	7,8	C3 acetofenona	0,032	783	C11H14O	162
44,00	8,65	C3 acetofenona	0,064	801	C11H14O	162
29,20	7,69	dihidroxi acetofenona	0,134	844	C8H8O3	152
35,80	7,44	C1 dihidroxi acetofenona	0,050	745	C9H10O3	166
44,60	10,33	C1 etoxi acetofenona	0,017	714	C11H14O2	178
65,80	11,29	fenil acetofenona	0,014	725	C14H12O	196
31,00	8,35	metoxi acetofenona	0,099	906	C9H10O2	150
30,40	8,08	metoxi acetofenona	0,032	832	C9H10O2	150
22,20	7	hidroxi acetofenona	0,045	725	C8H8O2	136
37,20	9,04	hidroxi acetofenona	0,224	916	C8H8O2	136
40,00	9,35	hidroxi acetofenona	0,202	903	C8H8O2	136
29,40	7,29	C1 hidroxi acetofenona	0,034	881	C9H10O2	150
31,40	7,43	C1 hidroxi acetofenona	0,034	804	C9H10O2	150
38,60	8,91	C1 hidroxi acetofenona	0,043	747	C9H10O2	150
42,40	9,02	C1 hidroxi acetofenona	0,067	888	C9H10O2	150
42,80	8,92	C1 hidroxi acetofenona	0,009	789	C9H10O2	150
44,00	9,55	C1 hidroxi acetofenona	0,527	911	C9H10O2	150
45,00	8,59	alil hidroxi acetofenona	0,043	717	C11H12O2	176
20,00	5,27	metoxi hidroxi acetofenona	0,657	747	C9H10O3	166
39,20	8,47	vinil acetofenona	0,655	844	C10H10O	146
51,60	11,71	acenaftilenona	0,021	893	C12H8O	168
40,60	11,12	C1 propiofenona	0,020	844	C10H12O	148
35,60	7,47	dihidroxi propiofenona	0,101	821	C9H10O3	166

44,80	9,73	hidroxi metoxi propiofenona	0,037	846	C10H12O3	180
37,00	8,16	metoxi propiofenona	0,066	740	C10H12O2	164
37,20	8,04	metoxi propiofenona	0,012	821	C10H12O2	164
13,40	5,29	furanil propanona	0,036	821	C7H8O2	124
21,00	6,3	C1 furanil propanona	0,013	817	C8H10O2	138
26,20	7,08	fenil butanona	0,014	714	C10H12O	148
22,60	6,35	C1 furanil butanona	0,104	890	C9H12O2	152
6,60	3,12	hidroxi pentanona	0,022	824	C5H10O2	102
6,80	3,09	hidroxi pentanona	0,055	810	C5H10O2	102
7,20	3,14	C1 hidroxi pentanona	1,131	907	C6H12O2	116
31,20	7,65	fenil butenona	0,059	673	C10H10O	146
38,40	8,65	C1 fenil butenona	0,196	671	C11H12O	160
35,20	7,98	fenil pentenona	0,046	746	C11H12O	160
35,40	8,32	furanil pentenona	0,015	673	C9H10O2	150
6,40	2,63	C1 pentenona	0,209	957	C6H10O	98
9,80	4,97	hexanodiona	0,078	900	C6H10O2	114
7,00	3,82	ciclopentenona	0,867	951	C5H6O	82
9,40	5,25	ciclopentenona	0,176	716	C6H6O2	82
13,00	6,19	ciclopentenona	0,107	722	C5H6O	82
15,40	8,74	ciclopentenona	0,020	819	C5H8O	84
9,20	4,31	C1 ciclopentenona	0,464	957	C6H8O	96
11,40	5,62	C1 ciclopentenona	1,225	965	C6H8O	96
19,60	6,2	C2 hidroxi ciclopentenona	0,093	864	C7H10O2	126
10,40	4,2	C2 ciclopentenona	0,043	842	C7H10O	110
10,60	4,31	C2 ciclopentenona	0,027	818	C7H10O	110
12,80	5,18	C2 ciclopentenona	0,314	847	C7H10O	110
14,00	5,79	C2 ciclopentenona	0,147	898	C7H10O	110
15,00	5,9	C2 ciclopentenona	1,048	877	C7H10O	110
16,80	6,63	C2 ciclopentenona	0,267	851	C7H10O	110
17,20	6,57	C2 ciclopentenona	0,138	869	C7H10O	110
16,20	5,44	C3 ciclopentenona	0,103	870	C8H12O	124
7,20	3,75	ciclopentenodiona	0,897	844	C5H4O2	96
8,40	4,56	ciclopentenodiona	0,072	873	C5H4O2	96
14,20	5,95	C1 ciclopentenodiona	0,395	923	C6H8O2	112
14,40	6,08	C1 ciclopentenodiona	0,438	931	C6H8O2	112
16,00	5,32	C2 ciclopentenodiona	0,160	798	C7H10O2	126
10,00	5,01	ciclohexenona	0,095	939	C6H8O	96
11,40	7,01	ciclohexenona	0,017	845	C6H8O	96
15,80	6,47	C1 ciclohexenona	0,085	921	C7H10O	110
19,20	7,05	C2 ciclohexenona	0,056	712	C8H12O	124
27,60	9,79	C3 ciclohexenona	0,019	766	C9H14O	138
15,40	5,2	C2 ciclohexadienona	0,076	720	C8H10O	122
18,80	5,95	C2 ciclohexadienona	0,266	792	C8H10O	122
13,00	5,5	ciclohexenodiona	0,176	884	C6H8O2	112
14,40	6,64	ciclohexenodiona	0,529	845	C6H6O2	110
21,80	7,95	C2 ciclohexadienodiona	0,013	834	C8H8O2	136
29,00	9,26	C2 ciclohexadienodiona	0,025	727	C8H8O2	136
29,20	9,15	C2 ciclohexadienodiona	0,090	732	C8H8O2	136
33,80	11,35	ciclooctanodiona	0,184	788	C8H12O2	140

9,00	4,2	furanil etanona	0,017	878	C6H6O2	110
9,40	4,36	furanil etanona	0,266	937	C6H6O2	110
36,20	8,93	benzo furanil etanona	0,017	896	C10H8O2	160
38,40	9,23	benzo furanil etanona	0,069	754	C10H8O2	160
9,40	6,44	furanona	0,440	947	C4H4O2	84
10,20	6,04	C1 furanona	0,207	935	C5H6O2	98
11,80	6,91	C1 furanona	0,397	943	C5H6O2	98
15,00	8,85	C1 furanona	0,236	943	C5H6O2	98
14,60	7,22	C2 furanona	0,064	798	C6H8O2	112
9,20	6,32	dihidro furanona	0,088	929	C4H6O2	86
10,80	6,19	C1 dihidro furanona	0,025	911	C5H8O2	100
13,00	6,22	C1 dihidro furanona	0,127	858	C6H8O2	112
19,60	10,7	acetil dihidro furanona	0,027	918	C6H8O3	128
20,00	10,4	acetil dihidro furanona	0,021	923	C6H8O3	128
32,20	8,13	benzofuranona	0,151	739	C8H6O2	134
33,60	11,61	benzofuranona	0,219	956	C8H6O2	134
40,80	11,43	C1 benzofuranona	0,025	858	C9H8O2	148
42,80	7,58	C2 benzofuranona	0,056	827	C10H10O2	162
33,60	9,43	C1 dihidro benzofuranona	0,023	737	C9H10O2	150
32,80	10,16	benzofuranodiona	0,030	812	C8H4O3	148
43,20	10,39	C2 hidroxil benzofuranona	0,044	767	C10H10O3	178
29,40	9,51	indanona	1,362	962	C9H8O	132
31,20	8,41	C1 indanona	0,253	912	C10H10O	146
32,00	8,65	C1 indanona	0,155	911	C10H10O	146
34,00	8,83	C1 indanona	0,289	878	C10H10O	146
36,40	9,35	C1 indanona	0,243	854	C10H10O	146
37,60	9,66	C1 indanona	0,210	851	C10H10O	146
38,00	8,31	C2 indanona	0,041	847	C11H12O	160
38,80	8,48	C2 indanona	0,167	804	C11H12O	160
41,20	8,81	C2 indanona	0,038	851	C11H12O	160
42,20	9,01	C2 indanona	0,041	753	C11H12O	160
43,20	9,27	C2 indanona	0,093	839	C11H12O	160
45,60	9,79	C2 indanona	0,112	721	C11H12O	160
47,00	10,15	C2 indanona	0,016	847	C11H12O	160
49,20	11,71	hidroxil indanona	0,075	859	C9H8O2	148
53,20	11,82	hidroxil indanona	0,073	817	C9H8O2	148
44,80	8,81	C1 hidroxil indanona	0,032	714	C10H10O2	162
51,00	10,47	C1 hidroxil indanona	0,031	766	C10H10O2	162
35,40	9,58	naftalenona	0,092	907	C10H10O	146
50,80	10,59	C1 hidroxil naftalenodiona	0,075	758	C11H8O3	188
51,40	10,65	C1 hidroxil naftalenodiona	0,088	773	C11H8O3	188
11,60	6,91	piranona	0,618	910	C5H4O2	96
9,00	4,85	dihidro piranona	0,007	860	C5H6O2	98
14,60	8,95	dihidro piranona	0,043	942	C5H6O2	98
19,80	6,5	C2 piranona	0,089	749	C7H8O2	124
21,00	9,12	C2 piranona	0,015	689	C7H8O2	124
25,20	8,51	C2 piranona	0,050	857	C7H8O2	124
37,00	10,82	benzopiranona	0,134	831	C9H6O2	146
39,20	11,59	benzopiranona	0,151	951	C9H6O2	146

46,20	11,16	C1 benzopiranona	0,035	902	C10H8O2	160
48,20	11,94	C1 benzopiranona	0,037	883	C10H8O2	160
35,80	10,93	dihidro benzopiranona	0,036	849	C9H8O2	148
40,00	8,67	C1 dihidro benzopiranona	0,250	763	C10H10O2	162
46,60	11,77	hidroxi benzopiranona	0,070	923	C9H6O3	162
Cetonas			22,841	147 picos		
39,00	8,17	Hidroxi benzoato de metila	0,014	890	C8H8O3	152
47,00	9,36	C2 benzoato de metila	1,445	733	C10H12O2	164
Ésteres			1,459	2 picos		
32,00	8,39	dihidro benzopirano	0,483	783	C9H10O	134
52,20	8,44	C2 metoxi benzopirano	0,060	773	C12H14O2	190
13,20	5,14	benzodioxole	0,039	914	C7H6O2	122
15,20	6,46	C2 dioxolane	0,011	780	C5H10O2	102
39,60	8,09	C4 benzodioxole	0,026	705	C11H14O2	178
31,40	6,91	metoxi estireno	0,017	786	C9H10O	134
52,80	11,17	C1 metoxi estireno	0,032	689	C10H12O	148
49,80	11,6	etoxi estireno	0,145	829	C10H12O	148
51,40	11,86	etoxi naftaleno	0,031	778	C12H12O	172
52,00	11,35	etoxi naftaleno	0,025	768	C12H12O	172
60,20	10,23	C1 fenoxi benzeno	0,022	632	C13H12O	184
19,20	6,54	C1 metoxi benzeno	0,014	772	C8H10O	122
37,80	7,82	C4 metoxi benzeno	0,042	743	C11H16O	164
27,00	7,08	C1 dimetoxi benzeno	0,021	857	C9H12O2	152
35,60	7,36	C2 dimetoxi benzeno	0,008	707	C10H14O2	166
44,20	7,28	C2 dimetoxi benzeno	0,043	778	C10H14O2	166
49,20	7,13	C3 dimetoxi benzeno	0,008	811	C11H16O2	180
13,60	5,32	C1 acetil furano	0,027	886	C7H8O2	124
14,80	5,84	C1 acetil furano	0,180	801	C7H8O2	124
19,80	6,26	C2 acetil furano	0,014	797	C8H10O2	138
6,40	2,37	C3 furano	0,032	867	C7H10O	110
8,60	2,78	C4 furano	0,009	764	C8H12O	124
11,40	4,53	C4 furano	0,028	721	C8H12O	124
27,20	7,67	bifurano	1,035	828	C8H6O2	134
34,20	9,21	C1 bifurano	0,193	398	C9H8O2	148
36,20	8,37	C1 bifurano	0,022	718	C10H10O2	162
8,40	3,17	dimetoxi tetrahidro furano	0,013	716	C6H12O3	132
8,80	3,42	dimetoxi tetrahidro furano	0,023	847	C6H12O3	132
9,00	3,39	dimetoxi tetrahidro furano	0,039	789	C6H12O3	132
37,60	8,3	C1 hidroxi benzofurano	0,070	837	C9H8O2	148
38,20	8,68	C1 hidroxi benzofurano	0,275	834	C9H8O2	148
38,40	8,41	C1 hidroxi benzofurano	0,479	845	C9H8O2	148
32,80	8,38	C1 benzofurano	0,086	855	C9H8O	132
33,80	8,27	C1 benzofurano	0,108	882	C9H8O	132
37,60	8,35	C2 benzofurano	0,106	789	C10H10O	146
49,00	8,45	C2 metoxi benzofurano	0,009	717	C11H12O2	176
33,00	9,91	metoxi benzofurano	0,049	687	C9H8O2	148
Éteres			3,825	37 picos		
12,40	4,67	fenol	1,944	952	C6H6O	94
16,00	5,28	C1 fenol	0,151	946	C7H8O	108

17,20	5,73	C1 fenol	6,255	843	C7H8O	108
17,40	5,35	C1 fenol	0,329	957	C7H8O	108
20,80	5,74	C2 fenol	0,028	819	C8H10O	122
21,40	5,89	C2 fenol	0,481	957	C8H10O	122
23,20	6,3	C2 fenol	0,010	897	C8H10O	122
23,40	6,24	C2 fenol	0,033	630	C8H10O	122
24,20	6,42	C2 fenol	0,669	942	C8H10O	122
26,40	6,05	C3 fenol	0,337	725	C9H12O	136
27,00	6,23	C3 fenol	0,108	918	C9H12O	136
28,40	6,19	C3 fenol	0,675	924	C9H12O	136
29,20	6,47	C3 fenol	0,013	851	C9H12O	136
29,60	6,61	C3 fenol	0,303	753	C9H12O2	136
31,00	7,03	C3 fenol	0,018	796	C9H12O	136
35,60	9,35	C3 fenol	0,050	823	C9H12O	136
27,60	6,66	C4 fenol	0,101	766	C10H14O	150
31,80	6,03	C4 fenol	0,009	871	C10H14O	150
32,00	6,12	C4 fenol	0,009	842	C10H14O	150
39,00	9,01	C4 fenol	0,080	792	C10H14O	150
41,80	10,01	C4 fenol	0,025	776	C10H14O	150
28,20	6,55	alil fenol	0,405	905	C9H10O	134
30,40	6,99	alil fenol	0,085	880	C9H10O	134
31,00	6,93	alil fenol	0,411	880	C9H10O	134
31,80	7,03	alil fenol	0,309	895	C9H10O	134
32,40	6,77	C1 alil fenol	0,038	864	C10H12O	148
36,00	7,07	C1 alil fenol	0,029	860	C10H12O	148
38,20	7,33	C1 alil fenol	0,439	904	C10H12O	148
38,20	7,75	C1 alil fenol	0,097	814	C10H12O	148
39,00	8,04	C1 alil fenol	0,094	780	C10H12O	148
39,60	7,23	C1 alil fenol	0,024	812	C10H12O	148
54,40	10,15	fenil fenol	0,018	863	C12H10O	170
55,00	10,38	fenil fenol	0,047	897	C12H10O	170
24,80	7,15	benzenodiol	8,358	735	C6H6O2	110
26,60	7,51	benzenodiol	0,187	861	C6H6O2	110
30,00	8,19	benzenodiol	0,724	897	C6H6O2	110
28,80	7,13	C1 benzenodiol	1,883	936	C7H8O2	124
29,60	6,68	C1 benzenodiol	0,277	819	C7H8O2	124
30,00	6,47	C1 benzenodiol	0,033	898	C7H8O2	124
30,40	6,34	C1 benzenodiol	0,110	927	C7H8O2	124
30,40	7,15	C1 benzenodiol	0,421	958	C7H8O2	124
31,00	6,89	C1 benzenodiol	0,548	960	C7H8O2	124
32,00	6,44	C1 benzenodiol	0,292	940	C7H8O2	124
32,80	11,33	C1 benzenodiol	0,142	704	C7H8O2	124
33,00	7,69	C1 benzenodiol	0,150	849	C7H8O2	124
34,20	8,59	C1 benzenodiol	1,343	722	C7H8O2	124
38,60	7,48	C1 benzenodiol	0,049	788	C7H8O2	124
40,60	8,8	C1 benzenodiol	0,025	637	C7H8O2	124
30,60	7,56	C1 benzenodiol	7,131	951	C7H8O2	124
31,60	7,42	C2 benzenodiol	0,326	778	C8H10O2	138
33,80	7,19	C2 benzenodiol	1,038	818	C8H10O2	138

34,40	7,39	C2 benzenodiol	0,848	828	C8H10O2	138
34,60	7,17	C2 benzenodiol	0,121	844	C8H10O2	138
36,60	7,72	C2 benzenodiol	3,897	903	C8H10O2	138
37,40	8,89	C2 benzenodiol	0,086	799	C8H10O2	138
37,80	7,66	C2 benzenodiol	0,332	848	C8H10O2	138
39,00	8,6	C2 benzenodiol	0,632	835	C8H10O2	138
38,80	7,17	C3 benzenodiol	0,104	831	C9H12O2	152
39,20	7,22	C3 benzenodiol	0,132	751	C9H12O2	152
42,00	7,54	C3 benzenodiol	1,754	824	C9H12O2	152
65,00	11,95	fluorenol	0,086	901	C13H10O	182
32,00	7,83	indanol	0,040	865	C9H10O	134
33,40	7,93	indanol	1,563	911	C9H10O	134
33,40	8	indanol	2,229	725	C9H10O	134
34,40	8,74	indenol	2,497	901	C9H8O	132
26,40	7,5	metoxi fenol	0,100	728	C7H8O2	124
24,20	6,48	C1 metoxi fenol	0,724	931	C8H10O2	138
35,00	8,22	C1 metoxi fenol	0,122	715	C8H10O2	138
38,40	7,62	C1 metoxi fenol	0,094	772	C8H10O2	138
35,20	6,5	C2 metoxi fenol	0,068	755	C10H14O2	152
40,00	7,43	C2 metoxi fenol	0,346	804	C9H12O2	152
41,40	7,71	C2 metoxi fenol	0,067	773	C9H12O2	152
43,00	7,67	C2 metoxi fenol	0,104	796	C9H12O2	152
43,80	8,12	C2 metoxi fenol	0,032	776	C9H12O2	152
46,40	7,66	C3 metoxi fenol	0,012	708	C10H14O2	166
40,60	9,71	C3 metoxi fenol	0,022	795	C10H14O2	166
31,80	7,34	vinil metoxi fenol	0,083	748	C9H10O2	150
34,40	7,07	alil metoxi fenol	0,133	900	C10H12O2	164
34,60	6,94	alil metoxi fenol	0,051	881	C10H12O2	164
37,60	7,41	alil metoxi fenol	0,140	876	C10H12O2	164
40,00	7,68	alil metoxi fenol	0,223	927	C10H12O2	164
17,80	6,17	metoxi fenol	0,202	914	C7H8O2	124
31,00	7,67	etoxi fenol	0,071	743	C8H10O2	138
32,20	7,39	propoxi fenol	0,073	715	C9H12O2	152
32,60	8,79	naftol	0,012	857	C10H8O	144
44,20	9,88	naftol	0,218	951	C10H8O	144
46,40	9,87	C1 naftol	0,026	898	C11H10O	158
49,40	9,79	C1 naftol	0,127	822	C11H10O	158
51,00	10,24	C1 naftol	0,139	841	C11H10O	158
58,40	10,61	C2 naftol	0,026	676	C12H12O	172
40,60	9,4	naftalenodiol	0,051	771	C10H8O2	160
42,60	9,67	naftalenodiol	0,158	838	C10H8O2	160
43,00	10,5	naftalenodiol	0,088	896	C10H8O2	160
Fenóis			54,493	93 picos		
8,00	2,88	C2 benzeno	0,116	954	C8H10	106
10,00	3,24	C3 benzeno	0,063	923	C9H12	120
14,40	3,84	C4 benzeno	0,010	920	C10H14	134
26,20	7,34	C4 benzeno	0,039	821	C10H14	134
36,60	7,58	C5 benzeno	2,024	752	C11H16	148
40,00	8,04	C5 benzeno	0,119	812	C11H16	148

50,20	10,57	C6 benzeno	0,030	754	C12H18	162
18,00	4,66	C2 estireno	0,017	926	C10H12	132
28,40	7,77	C1 estireno	0,050	839	C9H10	118
15,40	5,26	indeno	0,066	862	C9H8	116
23,40	5,57	C2 indeno	0,010	858	C11H12	144
28,40	6,25	C2 indeno	0,716	911	C11H12	144
30,20	6,62	C2 indeno	0,013	885	C11H12	144
35,60	6,28	C3 indeno	0,012	893	C12H14	158
35,80	6,49	C3 indeno	0,008	854	C12H14	158
47,20	8,77	C3 indeno	0,047	683	C12H16	160
35,00	7,64	C1 dihidro indano	0,024	782	C10H12	132
21,40	5,86	dihidro naftaleno	0,472	928	C10H10	130
72,40	8,54	C10 naftaleno	0,008	716	C20H28	268
Hidrocarbonetos			3,843	19 picos		
24,80	9,81	Derivado de açúcar	0,019	721	C6H8O4	144
Açúcar			0,019	1 pico		
Totais			100,000	379 picos		

A^a: área percentual calculada; PM^b: massa molecular do composto

Tabela 17: Identificação tentativa dos compostos dos extratos orgânico da fase aquosa (FA SE-LLE e FA SE-SPE) do bio-óleo de serragem de madeira (Lignocel) por GCxGC/TOFMS.

Identificação	Fórmula	FA-SPE			FA-LLE		
		¹ t _R (min)	² t _R (s)	Área (%) ^a	¹ t _R (min)	² t _R (s)	Área (%) ^a
ácido pentanóico	C5H10O2	nd	nd	nd	16,03	3,40	0,020
ácido pentenóico	C5H8O2	21,28	6,57	0,150	nd	nd	nd
ácido benzóico	C7H6O2	24,43	5,00	0,370	24,43	5,02	0,700
C1 ácido benzóico	C8H8O2	28,78	5,27	0,010	nd	nd	nd
ácido acetilbenzóico	C9H8O3	35,98	7,37	0,030	nd	nd	nd
dihidroxi ácido benzenoacético	C8H8O4	nd	nd	nd	37,93	5,85	0,610
C2 ácido benzóico	C9H10O2	37,93	6,11	0,300	nd	nd	nd
C2 ácido benzóico	C9H10O2	41,38	7,04	0,500	nd	nd	nd
ácidos		6 picos		1,360	3 picos		1,320
Dianidro glucopiranosose	C6H8O4	25,78	7,31	0,190	nd	nd	nd
Dianidro glucopiranosose	C6H8O4	26,53	7,29	1,000	26,53	7,28	0,580
Anidro manosan	C6H8O4	27,28	7,35	0,170	27,28	7,35	0,150
Anidro galactosano	C6H8O4	nd	nd	nd	27,88	7,81	0,010
Anidro galactosano	C6H8O4	35,08	7,21	0,280	nd	nd	nd
açúcares		4 picos		1,630	3 picos		0,740
ciclohexanol	C6H10O	13,63	5,16	0,030	13,63	5,16	0,030
hexenol	C6H12O	15,43	5,31	0,020	nd	nd	nd
C1 benzenometanol	C8H10O	27,43	6,22	0,040	nd	nd	nd
nonenol	C9H18O	36,43	8,93	0,250	nd	nd	nd
alcoóis		4 picos		0,340	1 pico		0,030
benzenoacetaldeído	C8H8O	18,73	5,50	0,010	18,73	5,51	0,030
dihidroxi benzaldeído	C7H6O3	nd	nd	nd	24,28	5,89	0,090
hidroxi benzaldeído	C7H6O2	31,03	6,41	0,510	nd	nd	nd
hidroxi benzaldeído	C7H6O2	nd	nd	nd	31,18	6,33	0,340

hidroxi benzaldeído	C7H6O2	33,58	6,65	0,400	33,73	6,59	0,290
vanilina	C8H8O3	34,63	7,46	1,880	34,63	7,47	1,870
C1 hidroxi benzaldeído	C8H8O2	nd	nd	nd	36,13	6,96	0,090
C1 hidroxi benzaldeído	C8H8O2	36,28	6,89	0,460	36,28	6,90	0,530
C1 hidroxi benzaldeído	C8H8O2	49,03	7,85	0,040	nd	nd	nd
hexadienol	C6H10O	nd	nd	nd	11,53	3,98	0,200
furanil propenal	C7H6O2	nd	nd	nd	23,53	7,20	0,060
furanil propenal	C7H6O2	nd	nd	nd	26,68	7,64	0,090
C1 hidroxi furfural	C6H6O3	27,73	6,94	1,080	27,88	6,86	0,810
C1 hidroxi furfural	C6H6O3	29,08	6,24	0,080	nd	nd	nd
C1 hidroxi furfural	C6H6O3	29,23	6,17	0,140	nd	nd	nd
C2 furfural	C7H8O2	32,23	6,54	0,210	32,23	6,54	0,170
furfural	C5H4O2	10,48	4,08	0,010	nd	nd	nd
dihidro pirancarboxaldeído	C6H8O2	nd	nd	nd	20,08	6,34	0,030
dihidro pirancarboxaldeído	C6H8O2	nd	nd	nd	23,98	7,08	0,040
nonadienal	C9H14O	nd	nd	nd	27,28	7,62	0,060
aldeídos		11 picos		4,840	15 picos		4,690
pentenona	C5H8O	8,23	2,93	0,020	8,23	2,94	0,030
ciclopentenona	C5H6O	nd	nd	nd	10,63	4,23	2,310
ciclopentenodiona	C5H4O2	10,63	4,21	1,370	10,78	4,18	0,650
C1 ciclopentenona	C6H8O	13,03	4,49	0,250	13,03	4,49	0,330
hidroxi ciclopentenona	C5H6O2	13,78	4,74	0,020	13,78	4,74	0,060
C1 ciclopentenona	C6H8O	15,58	5,21	0,320	15,43	5,28	0,160
C1 ciclopentenona	C6H8O	nd	nd	nd	15,58	5,22	0,610
C1 ciclopentanodiona	C6H8O2	17,98	5,25	1,240	17,98	5,29	2,110
C2 ciclopentenona	C7H10O	nd	nd	nd	18,58	5,27	0,200
metoxi pentanona	C6H12O2	18,73	5,62	0,150	18,73	5,63	0,140
ciclopentenona	C5H8O	19,18	7,08	0,420	19,18	7,09	0,520
C2 ciclopentenona	C7H10O	20,38	5,59	0,060	20,38	5,59	0,290
C2 hidroxi ciclopentenona	C7H10O2	22,18	5,31	0,050	nd	nd	nd
dihidro pentalenona	C8H8O	28,93	7,14	0,020	nd	nd	nd
C1 hidroxi ciclopentenona	C6H8O2	32,68	8,15	0,220	32,68	8,15	0,200
hexenona	C6H10O	nd	nd	nd	21,58	5,80	0,030
hexenona	C6H10O	nd	nd	nd	23,53	6,87	0,060
hexenona	C6H10O	26,23	7,42	0,090	nd	nd	nd
ciclohexenodiona	C6H6O2	13,33	5,27	0,050	13,48	5,22	0,040
ciclohexanodiona	C6H8O2	20,83	8,07	0,070	20,83	8,07	0,090
C1 ciclohexenona	C7H10O	23,98	6,79	0,280	nd	nd	nd
C1 ciclohexenona	C7H10O	nd	nd	nd	23,98	6,79	0,310
C2 ciclohexanona	C7H10O	18,58	5,27	0,070	18,58	5,03	0,240
C2 ciclohexadienodiona	C8H8O2	21,58	5,71	0,100	21,58	5,72	0,030
C3 ciclohexenona	C9H14O	28,18	7,37	0,070	28,18	7,37	0,040
C1 alil ciclohexenona	C10H14O	30,28	6,09	0,370	30,28	6,08	0,230
hidroxi ciclohexanona	C6H10O2	22,33	6,69	0,060	22,33	6,70	0,070
heptenona	C7H12O	20,53	6,62	0,270	20,53	6,52	0,360
heptenona	C7H12O	22,03	6,73	0,100	nd	nd	nd

heptenona	C7H12O	23,38	6,25	0,020	nd	nd	nd
octenona	C8H14O	nd	nd	nd	24,58	6,53	0,000
octanona	C8H16O	26,08	5,91	0,030	nd	nd	nd
nonanona	C9H18O	18,88	6,16	2,200	nd	nd	nd
decanona	C12H24O	nd	nd	nd	34,63	8,28	0,160
dodecanona	C10H20O	38,08	7,35	0,200	38,08	7,37	0,200
hidroxi furanil etanona	C6H6O3	nd	nd	nd	20,68	5,85	0,240
C1 dimetoxi acetofenona	C11H14O3	34,03	4,05	0,200	nd	nd	nd
dihidroxi acetofenona	C8H8O3	nd	nd	nd	29,38	6,11	0,350
C1 dihidroxi acetofenona	C9H10O3	38,23	7,41	0,670	38,23	7,41	2,350
hidroxi acetofenona	C8H8O2	34,78	6,82	0,160	34,78	6,83	0,150
hidroxi acetofenona	C8H8O2	36,88	6,96	0,190	36,88	6,96	0,040
C1 hidroxi acetofenona	C9H10O2	39,43	7,13	0,370	39,43	7,13	0,420
hidroxi metoxi acetofenona	C9H10O3	25,93	3,80	2,710	nd	nd	nd
metoxi fenil propanona	C10H12O2	39,43	7,23	0,310	nd	nd	nd
hidroxi metoxi fenil propanona	C10H12O3	nd	nd	nd	40,03	7,32	0,060
C1 dihidroxi metoxi acetofenona	C9H10O4	41,98	7,17	0,070	41,98	7,17	0,070
Furanona	C4H4O2	13,78	6,16	0,100	13,78	6,13	0,510
C1 furanona	C5H6O2	nd	nd	nd	14,53	5,72	0,230
C1 furanona	C5H6O2	nd	nd	nd	16,03	6,17	0,240
C1 furanona	C5H6O2	19,03	7,07	1,030	19,03	7,07	2,060
C1 furanona	C5H6O2	nd	nd	nd	19,18	7,02	0,690
Benzofuranona	C8H6O2	31,03	6,62	0,370	nd	nd	nd
Benzofuranona	C8H6O2	32,53	8,53	0,060	32,53	8,53	0,130
C1 benzofuranona	C8H14	nd	nd	nd	32,83	7,08	0,050
dihidro furanona	C4H6O2	13,48	6,05	0,060	13,48	6,06	0,080
C2 dihidro furanona	C6H8O2	nd	nd	nd	20,53	6,62	0,360
dihidro hidroxi furanona	C4H6O3	24,88	7,78	0,040	nd	nd	nd
C1 dihidro hidroxi furanona	C5H8O3	25,93	8,15	0,840	25,93	8,10	0,200
C2 dihidroxi furanona	C6H8O4	15,88	4,04	0,040	nd	nd	nd
Indanona	C9H8O	29,53	7,24	0,200	29,53	7,25	0,330
Piranona	C5H4O2	15,88	6,23	0,050	15,88	6,23	0,120
Piranona	C5H4O2	16,63	6,18	0,130	16,63	6,18	0,150
Maltol	C6H6O3	22,18	5,96	0,340	22,18	5,97	0,600
dihidro piranona	C5H6O2	18,58	7,38	0,070	18,58	7,38	0,220
C1 dihidro piranona	C6H8O2	nd	nd	nd	17,53	5,72	0,520
C1 dihidro piranona	C6H8O2	17,68	5,66	0,510	17,68	5,67	0,160
tetrahidro piranona	C5H8O2	19,33	7,40	0,100	19,33	7,41	0,060
C1 hidroxi piranona	C6H6O3	nd	nd	nd	23,08	6,01	0,060
C1 dihidroxi piranona	C6H6O4	25,33	5,54	0,050	25,33	5,55	0,050
cetonas		51 picos		16,790	55 picos		19,960
Furoato de metila	C6H6O3	20,68	5,84	0,180	nd	nd	nd
ésteres		1 pico		0,180	nenhum pico		0,000
C1 furano	C5H6O	nd	nd	nd	18,43	6,12	0,050
Bifurano	C8H6O2	27,73	6,18	0,200	27,73	6,18	0,300
Bifurano	C8H6O2	nd	nd	nd	31,03	6,62	0,140

C1 benzofurano	C9H8O2	nd	nd	nd	32,83	6,65	0,150
C1 etoxi benzeno	C9H12O	37,78	6,44	0,040	nd	nd	nd
éteres		2 picos		0,240	4 picos		0,650
C1 metoxi fenol	C8H10O2	26,38	7,07	0,010	nd	nd	nd
C1 metoxi fenol	C8H10O2	nd	nd	nd	25,63	5,39	0,250
C3 metoxi fenol	C10H14O2	nd	nd	nd	37,18	7,28	0,010
Indanol	C9H10O	32,08	6,24	0,250	32,08	6,25	0,500
Indenol	C9H8O	32,83	6,65	0,100	nd	nd	nd
Indanol	C9H10O	nd	nd	nd	31,18	6,24	0,170
C1 indanol	C10H12O	35,38	6,22	0,060	35,38	6,22	0,090
Fenol	C6H6O	16,03	4,48	0,430	16,03	4,48	1,480
C1 fenol	C7H8O	19,33	4,78	0,190	19,33	4,79	0,630
C1 fenol	C7H8O	20,23	4,84	1,060	20,23	4,85	1,760
C2 fenol	C8H10O	23,08	4,96	0,010	23,08	4,97	0,110
C2 fenol	C8H10O	23,53	5,05	0,360	23,53	5,05	1,140
C2 fenol	C8H10O	24,43	5,07	0,580	24,43	5,08	1,180
C2 fenol	C8H10O	25,63	5,31	0,120	25,63	5,33	0,250
C3 fenol	C9H12O	27,58	5,20	0,270	27,58	5,21	0,610
C3 fenol	C9H12O	28,48	5,17	0,120	28,48	5,16	0,200
C3 fenol	C9H12O	28,93	5,36	0,020	28,93	5,37	0,050
C3 fenol	C9H12O	nd	nd	nd	26,08	5,23	0,010
alil fenol	C9H10O	28,33	5,43	0,110	28,33	5,43	0,200
alil fenol	C9H10O	30,88	5,70	0,020	30,88	5,71	0,050
C1 alil fenol	C10H12O	31,48	5,47	0,060	31,48	5,48	0,090
C4 fenol	C10H14O	nd	nd	nd	30,88	5,18	0,010
C4 fenol	C10H14O	36,88	7,25	0,230	37,03	7,18	0,190
C4 fenol	C10H14O	40,63	7,34	0,050	nd	nd	nd
butoxi fenol	C10H14O2	31,33	5,88	0,050	nd	nd	nd
benzenodiol	C6H6O2	nd	nd	nd	30,28	6,15	0,400
benzenodiol	C6H6O2	26,08	5,72	46,790	26,08	5,63	33,930
C1 benzenodiol	C7H8O2	28,78	5,74	3,670	28,93	5,69	3,540
C1 benzenodiol	C7H8O2	30,13	5,76	7,770	31,63	5,18	12,680
C1 benzenodiol	C7H8O2	nd	nd	nd	31,78	6,07	0,170
C1 benzenodiol	C7H8O2	32,68	6,58	0,780	32,83	6,50	0,200
C2 benzenodiol	C8H10O2	34,18	5,86	5,970	34,18	5,86	6,160
C2 benzenodiol	C8H10O2	35,23	6,05	0,220	35,23	6,05	0,220
C2 benzenodiol	C8H10O2	38,43	5,68	0,200	nd	nd	nd
C2 benzenodiol	C7H6O2	nd	nd	nd	33,43	5,38	0,050
C3 benzenodiol	C9H12O2	37,93	5,84	0,510	nd	nd	nd
fenóis		28 picos		70,010	30 picos		66,310
Tolueno	C7H8	8,68	2,81	1,780	8,68	2,84	2,540
C2 benzeno	C8H10	11,53	3,29	1,490	11,23	3,30	0,540
C2 benzeno	C8H10	12,28	3,53	0,280	11,53	3,30	1,760
C2 benzeno	C8H10	nd	nd	nd	12,43	3,50	0,490
C3 benzeno	C9H12	14,98	3,70	0,080	14,68	3,64	0,050
C3 benzeno	C9H12	15,13	3,68	0,180	15,13	3,68	0,360
C3 benzeno	C9H12	nd	nd	nd	15,88	3,85	0,050
C3 benzeno	C9H12	16,33	3,88	0,060	16,48	3,86	0,280
C3 benzeno	C9H12	17,68	4,15	0,010	17,68	4,16	0,020

Tese de Doutorado

C4 benzeno	C10H14	17,83	3,78	0,030	17,83	3,78	0,050
Indano	C9H10	18,28	4,52	0,010	18,28	4,53	0,070
octadieno	C8H14	nd	nd	nd	32,83	7,26	0,050
hidrocarboneto insaturado		42,13	3,40	0,020	nd	nd	nd
hidrocarboneto insaturado		49,33	3,52	0,020	nd	nd	nd
Octano	C8H18	9,43	2,35	0,320	nd	nd	nd
Nonano	C9H20	12,58	2,55	0,140	12,58	2,56	0,030
Decano	C10H22	16,63	2,74	0,050	nd	nd	nd
hidrocarboneto saturado		34,63	3,13	0,040	nd	nd	nd
hidrocarboneto saturado		42,43	3,27	0,070	nd	nd	nd
hidrocarboneto saturado		47,68	3,32	0,020	nd	nd	nd
hidrocarboneto saturado		49,63	3,39	0,020	nd	nd	nd
hidrocarbonetos		18 picos		4,610	13 picos		6,310
totais		125 picos		100,000	124 picos		100,000

A³: área percentual calculada; nd: não detectad

