

## SÚMULA DA DISCIPLINA

### 1. Identificação

Código e nome da disciplina: QUP 130 – Tópicos Especiais em Cromatografia Multidimensional

Professores responsáveis: Claudia Alcaraz Zini, Rosângela Assis Jacques

Nível: Mestrado e Doutorado

Carga horária: 30 h

Créditos: 2 (dois)

Revisado e atualizado em: Agosto\_2021

### 2. Ementa

Introdução às técnicas cromatográficas multidimensionais, histórico, fundamentos, instrumentação, moduladores, nomenclatura, abreviações, análise de misturas complexas por GCxGC (petróleo e derivados, óleos fixos, óleos essenciais, aromas e fragrâncias, amostras ambientais, amostras de origem biológicas, amostras forenses, etc), perspectivas futuras.

### 3. Objetivo

Espera-se que o aluno adquira os conceitos básicos relacionados à cromatografia multidimensional abrangente e de frações parciais, tanto no que diz respeito à cromatografia gasosa, como no que tange à cromatografia líquida. Além disso, o aluno deverá saber aplicar estes conhecimentos em casos práticos relacionados à análise de amostras complexas, como petróleo e derivados, amostras ambientais, forenses, aromas, alimentos e bebidas, etc.

### 4. Conteúdo Programático

-Introdução às técnicas cromatográficas multidimensionais: Cromatografia Líquida e por Exclusão Bidimensional Abrangente (LCxSEC), Cromatografia Líquida e Gasosa Bidimensional Abrangente (LCxGC), Cromatografia Líquida Bidimensional Abrangente (LCxLC), Nano LC: princípios, evolução, colunas, sistemas de detecção estado da arte da técnica; aplicações; Cromatografia Supercrítica e Gasosa Bidimensional Abrangente (SFCxGC), Cromatografia Gasosa Tridimensional Abrangente (GCxGCxGC), Cromatografia por exclusão de tamanho, líquida e eletroforese capilar tridimensional abrangente (SECxLCxCZE), Cromatografia Líquida Acoplada à Cromatografia Gasosa Bidimensional Abrangente em linha (LC-GCxGC), Cromatografia Gasosa Bidimensional Abrangente com Duas Colunas Paralelas na Segunda Dimensão (GGx2GC), cromatografia gasosa acoplada a detector de espectrometria de massas (GC/MS), etc.

-Histórico da cromatografia bidimensional, com ênfase na GCxGC de heart-cut e GCxGC abrangente.

-Fundamentos (ortogonalidade, tipos de diagramas, efeito telhado, escolha de colunas em função de fases e dimensões, quiralidade, modulação em fase e fora de fase, pico primário, ciclo de modulação, pico fora de ciclo, etc.).

-Nomenclatura e abreviações.

-Instrumentação (moduladores, detectores).

-Processamento de dados (índices de retenção, interpretação, quimiometria)

-Aplicações: petroquímica (diesel, gasolina, mistura biodiesel e diesel, frações pesadas), aromas e fragrâncias e óleos essenciais, indústria farmacêutica (resíduos de solventes, drogas), óleos essenciais e fixos, amostras ambientais (pesticidas em frutas e vegetais, ar e aerossóis, fumaça de cigarro, produtos de pirólise), amostras forenses (incêndios, derramamentos de petróleo), amostras biológicas (drogas, esteróis, esteróides, metabólômica).

- Perspectivas futuras (processamento de dados, interpretação de dados, análise em campo, novos moduladores)

## 5. Avaliação

O aluno será avaliado através de: (i) Monografia: cada aluno escreverá uma monografia, a qual será apresentada tanto na forma escrita como em exposição oral ilustrada (pôster, transparências, slides) de cerca de 30 minutos sobre temas de interesse da disciplina. Um resumo do trabalho será entregue aos colegas no dia da apresentação ou (ii) Trabalhos eventuais: Cada aluno deverá ler, preparar e apresentar um artigo científico da área de Cromatografia Multidimensional, apresentando-o oralmente com recursos visuais (pôster, transparências, slides), entregando um texto relativo ao trabalho ao professor e um resumo para os colegas no dia da apresentação. Um exercício de verificação de conhecimentos, com ou sem consulta, pode também ser empregado, a depender o perfil de conhecimentos da turma. Será considerado aprovado o aluno que obtiver conceito final A, B ou C, atribuídos conforme relação abaixo:

A - Ótimo (90 a 100%)

B - Bom (75% a 89%)

C - Regular (60 a 74%)

D - Insuficiente (abaixo de 60%)

FF - Sem frequência

## 6. Método de Trabalho/Ensino

Aulas teórico-expositivas e seminários.

## 7. Bibliografia

- I. Marion, al. J. Pharm. Biomed Anal. 145, 482, 2017.
- P. Q. Tranchida, et al. Flavour Fragr. J. 32, 218, 2017.
- F. Salvatore, Electrophoresis 38, 1822, 2017.
- T. R. Bjerk, et al. Scientia Chromatographica 9, 101, 2017.
- F. Cacciola, et al. J. Sep. Sci. 40, 7, 2017.
- D. R. Stoll, et al. Anal. Chem. 2017, 89, 519–531.
- P. Q. Tranchida, et al. J. Sep. Sci. 39, 149, 2016.
- F. A. Franchina, et al. J. Chromatogr A 1441, 134, 2016
- F. A. Franchina, et al. Mass Spectrometry Reviews 35, 524, 2016.
- J. V. Seeley, et al. J. Chromatogr. A, 1255, 24, 2012, 24-37.
- L. L. P. van Stee, et al. Trends Anal Chem 83, 1, 2016.
- P. J. Schoenmakers, et al. LCGC Eur. 2003, 1.
- C. von Muhlen, et al. Quím. Nova 30, 682, 2007.
- W. Bertsch, et al. J. High Resol. Chromatogr. 1999, 22, 647.
- P. J. Marriott, et al. TrAC, Trends Anal. Chem. 2002, 21, 573.

- G. S. Frysjer, et al. Environ. Forensics 2002, 3, 27.
- R. Shellie, et al. Flavour Frag. J. 2003, 18, 179.
- P. J. Marriott, et al. Clin. Chim. Acta 2003, 328, 1.
- P. J. Marriott, et al. LCGC Eur. 2003, 16, 23.
- T. Gorecki, et al. J. Sep. Sci. 2004, 27, 359.
- J. Beens, et al. Anal. Bioanal. Chem. 2004, 378, 1939.
- K. MacNamara, et al. LCGC North Am. 2004, 22, 167.
- M. Adahchour, et al. TrAC, Trends Anal. Chem. 2006, 25, 438.
- M. Adahchour, et al. TrAC, Trends Anal. Chem. 2006, 25, 540.
- M. Adahchour, et al. TrAC, Trends Anal. Chem. 25, 726, 2006.
- M. Adahchour, et al. TrAC, Trends Anal. Chem. 25, 821, 2006.
- C. von Mühlen, et al. Quím. Nova 29, 765, 2006.
- C. von Mühlen, et al. J. Chromatogr., A 2006, 1105, 39.
- C. von Mühlen, et al. J. Sep. Sci. 30, 3223, 2007.
- C. von Mühlen, et al. J. Sep. Sci. 29, 1909, 2006.
- H. G. Janssen, et al. J. Chromatogr., A 2003, 1000, 385.
- A. W. Moore Jr., et al. Anal. Chem. 1995, 67, 3456.