

NOMENCLATURA NA LÍNGUA PORTUGUESA EM CROMATOGRAFIA MULTIDIMENSIONAL ABRANGENTE

Carin von Mühlen, Cláudia Alcaraz Zini* e Elina Bastos Caramão

Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves, 9500, 91501-970 Porto Alegre - RS, Brasil

Philip J. Marriott

School of Applied Sciences, Australian Centre for Research on Separation Science, Royal Melbourne University, GPO Box 2476V, Victoria 3001, Melbourne, Australia

Recebido em 26/10/05; aceito em 14/9/06; publicado na web em 7/2/07

NOMENCLATURE FOR COMPREHENSIVE MULTIDIMENSIONAL CHROMATOGRAPHY IN PORTUGUESE LANGUAGE.

Comprehensive Multidimensional Chromatography is a relatively new analytic technique, which is receiving growing attention in many parts of the world, including recently in Brazil. This work presents terms in Portuguese which are commonly used in Comprehensive Multidimensional Chromatography in order to help standardize the vocabulary employed in this area in the scientific literature. It also includes some symbols, their nominations, and explanation of some terms, whenever necessary. This proposal does not intend to be comprehensive or definitive; on the contrary, it intends to be a first step in the process of establishing a standardized nomenclature, serving as a base for a further sound discussion in the scientific community realm.

Keywords: comprehensive multidimensional chromatography; nomenclature; comprehensive two dimensional gas chromatography.

INTRODUÇÃO

O uso de termos, abreviações e símbolos em áreas novas do conhecimento científico pode conduzir à propagação de uma grande variedade de expressões, muitas delas inadequadas, dificultando a comunicação entre os integrantes da comunidade científica e demais profissionais da área, como também a compreensão dos fenômenos científicos envolvidos. A cromatografia multidimensional abrangente é uma área relativamente nova dentre as técnicas de separação, a qual tem experimentado rápido desenvolvimento em várias partes do mundo e que apresenta também no Brasil excelentes perspectivas de crescimento¹.

Para que uma técnica cromatográfica multidimensional seja considerada abrangente, todo o efluente da primeira dimensão, ou uma parte suficientemente representativa do mesmo, deverá ser introduzida na segunda dimensão, mantendo as características da separação ocorrida na primeira dimensão^{2,3}. Se apenas algumas regiões da primeira dimensão forem introduzidas na segunda, a técnica será multidimensional, mas não abrangente. Na cromatografia gasosa bidimensional (GC-GC) e na cromatografia líquida bidimensional (LC-LC) do tipo "heart-cut", pequenas frações do efluente da primeira coluna são transferidas para uma segunda coluna, onde a seletividade diferenciada desta segunda coluna fornece um aumento da resolução dos picos cromatográficos da zona de "heart-cut". Entretanto, apenas algumas regiões da primeira dimensão são transferidas para a segunda, sendo portanto, uma técnica não abrangente⁴.

A cromatografia multidimensional abrangente é também caracterizada pela utilização sequencial de duas colunas, uma com dimensões convencionais e a outra mais curta (do tipo de coluna usada em cromatografia rápida), havendo um modulador entre elas. As colunas devem ter fases estacionárias diferentes, permitindo que a separação pouco eficiente, obtida na primeira coluna, seja

melhorada na segunda. O sistema de modulação entre as duas colunas causa uma compressão da banda cromatográfica que elui da primeira coluna, sendo esta banda direcionada para a coluna curta, de forma que a separação obtida na primeira coluna é mantida e aquela na segunda é extremamente rápida, resultando em uma separação cromatográfica abrangente⁵.

A terminologia adotada na língua inglesa para a cromatografia multidimensional abrangente foi discutida por pesquisadores da área em uma seção do Primeiro Simpósio em Cromatografia Gasosa Multidimensional Abrangente ("First International Symposium on Comprehensive Multidimensional Gas Chromatography") na Holanda, em 2003. Tal terminologia originou-se a partir da linguagem corrente empregada entre pesquisadores que atuam no campo da cromatografia gasosa bidimensional abrangente, entretanto, pode também ser aplicada para outras técnicas multidimensionais em cromatografia. Este trabalho baseia-se em publicação científica resultante de discussões sobre nomenclatura ocorridas no referido Simpósio² e em recomendações da União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC – "International Union of Pure and Applied Chemistry")⁶⁻¹⁰. As recomendações da IUPAC não dizem respeito à cromatografia multidimensional abrangente, mas são relativas à nomenclatura para cromatografia e datam de 1993⁶, com algumas alterações realizadas em 1997⁷, e atualizações de 1998, apresentadas em versão eletrônica⁸.

No Brasil, ainda não existem normas para uniformização da nomenclatura na área da cromatografia multidimensional abrangente e nem mesmo na área mais ampla da cromatografia. Entretanto, artigos sobre terminologia no campo da cromatografia em língua portuguesa, auxiliam na proposição de termos que são comuns tanto à cromatografia como à cromatografia multidimensional abrangente^{1,11-13}. A terminologia apresentada neste trabalho tem como finalidade facilitar a comunicação científica, traduzindo-se, portanto, em uma linguagem científica clara e simples. Ao longo deste artigo, quando necessário, são oferecidas breves explicações sobre alguns dos termos apresentados. As abreviações e símbolos são aqueles já empregados nos textos de língua inglesa.

*e-mail: cazini@iq.ufrgs.br

O objetivo deste trabalho é apresentar uma proposta básica para a nomenclatura a ser empregada na área de cromatografia multidimensional abrangente, a fim de facilitar a padronização dos seus termos, abreviações e símbolos. A publicação de uma proposta de nomenclatura em um momento em que esta técnica está iniciando sua expansão no Brasil encontra eco no anseio de não proliferação de termos, abreviações e símbolos inadequados, promovendo melhor compreensão da técnica pela uniformização prévia de sua terminologia. A expectativa é que a exposição desta proposta à comunidade científica possa trazer aperfeiçoamento da mesma através de sugestões e críticas dos pesquisadores e demais profissionais envolvidos na área.

ABREVIACÕES

No primeiro artigo sobre cromatografia gasosa bidimensional abrangente, Liu e Phillips³ não apresentaram possíveis abreviações para o nome desta técnica, mas segundo Giddings¹⁴, para abreviar o termo “bidimensional abrangente” deve ser usado um sinal de multiplicação “x”, denotando a ortogonalidade entre os mecanismos de separação das duas colunas. Este sinal torna clara a diferença para as técnicas em linha, ou “heart-cut”, onde o hífen “-” é utilizado (GC-GC, LC-GC)². O hífen também é utilizado para simbolizar o acoplamento entre um sistema cromatográfico e um detector (como ex., GC-FID). Quando o detector implica também uma segunda dimensão de separação, como a separação de íons que ocorre em um espectrômetro de massas, a barra deve ser utilizada “/” (GC/MS, LC/MS)^{15,16}.

Neste artigo, utilizamos as abreviações sugeridas no Primeiro Simpósio em Cromatografia Gasosa Multidimensional Abrangente² e outras apresentadas na Tabela 1.

Tabela 1. Abreviações sugeridas no Primeiro Simpósio em Cromatografia Gasosa Multidimensional Abrangente² e outras abreviações

GC x GC	Cromatografia Gasosa Bidimensional Abrangente
GC x GC-FID	Cromatografia Gasosa Bidimensional Abrangente com Detector de Ionização em Chama
GC x GC/MS	Cromatografia Gasosa Bidimensional Abrangente com Detector de Massas
LC x LC	Cromatografia Líquida Bidimensional Abrangente
LC x SEC	Cromatografia Líquida e por Exclusão Bidimensional Abrangente
LC x GC	Cromatografia Líquida e Gasosa Bidimensional Abrangente
SFC x GC	Cromatografia Supercrítica e Gasosa Bidimensional Abrangente
GC x GC x GC	Cromatografia Gasosa Tridimensional Abrangente
SEC x LC x CZE	Cromatografia por exclusão de tamanho, Líquida e eletroforese capilar tridimensional abrangente ²⁵
LC x GC x GC	Cromatografia Líquida Acoplada à Cromatografia Gasosa Bidimensional Abrangente em linha
GG x 2GC	Cromatografia Gasosa Bidimensional Abrangente com Duas Colunas Paralelas na Segunda Dimensão

Em março de 2005 foi realizada uma conferência em San Diego, EUA, promovida pela Sociedade Americana de Química (“American Chemical Society”), visando a atualização dos termos e definições relacionados à espectrometria de massas adotados pela IUPAC. Deste encontro surgiu um projeto intitulado “Projeto Definições e Termos em Espectrometria de Massas” (“Mass Spectrometry Terms

and Definitions Project”), para o qual foi criada uma página na internet¹⁰, com o objetivo de buscar contribuições da comunidade científica, em conjunto com as sociedades e os jornais especializados em espectrometria de massas. Por ocasião desta pesquisa, não foram encontradas contribuições referentes à utilização de GC/MS ou GC-MS. Esta página cita como referência um artigo de Boggess de 2001¹⁵, onde foi apresentada uma revisão do livro de Sparkman¹⁶ sobre espectrometria de massas. Nesta revisão o autor utiliza o termo GC/MS para a técnica. Vários fabricantes de equipamentos para GC/MS também adotam esta terminologia¹⁷⁻¹⁹, seguindo o princípio da utilização da barra para instrumentos chamados híbridos, que são independentes entre si, como neste caso¹⁹. A IUPAC recomenda a utilização da barra para o acoplamento entre espectrômetro de massas (MS) e outras técnicas, como eletroforese capilar acoplada à espectrometria de massas por tempo de voo - CZE/TOFMS¹⁰. Esta lógica foi adotada para a utilização de barra em GC x GC/MS.

ALGUNS TERMOS PROPOSTOS, SEUS SÍMBOLOS E EXPLICAÇÕES

Cromatografia Multidimensional Abrangente (“Comprehensive Multidimensional Chromatography”) – a análise Multidimensional em Cromatografia pode ser considerada como qualquer técnica que combine duas ou mais separações distintas, onde pelo menos um dos passos envolva uma separação cromatográfica. Desta forma, LC-GC, GC-GC e GC/MS são métodos tipicamente multidimensionais²⁷.

Como pode ser visto na Tabela 1, existem vários tipos de Cromatografia Multidimensional Abrangente, portanto o termo “multidimensional” pode estar se referindo a bidimensional, tridimensional, etc. A escolha do termo “abrangente” em português deve-se à sua melhor adequação à tradução do termo “comprehensive” do inglês. A tradução deste vocábulo por “compreensiva” seria um anglicismo semântico, de acordo com o Dicionário Houaiss da Língua Portuguesa²⁰.

Para uma técnica ser considerada abrangente é necessário que atenda a três critérios: todas as partes da amostra devem ser submetidas a duas separações distintas; percentagens iguais de todos os componentes da amostra (100% ou menos) devem passar pelas colunas e eventualmente chegar ao detector e, a separação obtida na dimensão anterior (resolução) deve ser essencialmente mantida².

Ortogonalidade (“Orthogonality”) – a definição sugerida por Schoenmakers *et al.*² para o termo “ortogonalidade” no campo dos Métodos de Separação difere das definições empregadas em outras áreas, como por ex. na Matemática e na Estatística. Em Matemática, a ortogonalidade refere-se a dois vetores ou funções perpendiculares, cujo produto é igual a zero e em Estatística refere-se a variáveis estatisticamente independentes. No âmbito dos Métodos de Separação, para que as duas dimensões da cromatografia multidimensional abrangente sejam ortogonais, é necessário que os mecanismos de retenção de cada coluna sejam completamente independentes. A eficiência da separação depende do tipo de amostra e do conjunto de colunas empregado na primeira e segunda dimensões e não, necessariamente, da ortogonalidade do sistema bidimensional. A forma mais tradicional em GC x GC de separação ortogonal é a utilização de uma coluna apolar, ou de baixa polaridade na primeira dimensão (separação por ponto de ebulição) e uma coluna polar na segunda dimensão (separação por polaridade). Mesmo assim, a ortogonalidade irá depender do tipo de interação dos analitos com as colunas e do grau de correlação entre as fases estacionárias das duas colunas, podendo o sistema ser parcial ou relativamente ortogonal²¹. Em alguns casos, a separação

pode não ser ortogonal para todos os analitos, por ex., quando a primeira dimensão separa os compostos de acordo com o ponto de ebulição, e a segunda dimensão é estereosseletiva. Para uma discussão mais profunda do tema, Ryan e colaboradores²¹ publicaram um trabalho sobre ortogonalidade em GC × GC.

Para um sistema LC × LC ser ortogonal, pode-se utilizar cromatografia líquida em fase normal em uma das dimensões e em fase reversa na outra dimensão²². Deve-se, entretanto, levar em consideração a compatibilidade entre as fases móveis. Para outras técnicas multidimensionais abrangentes, tais como LC × SEC²³, LC × GC²⁴, SEC × LC × CZE²⁵, os diferentes mecanismos de separação para se chegar à ortogonalidade são mais claros.

Modulador (“Modulator”) – interface entre as duas colunas cromatográficas em um sistema bidimensional abrangente, que acumula e/ou amostra bandas estreitas do eluato da primeira coluna para reinjeção rápida na segunda. Apesar da técnica ter apenas 15 anos, vários moduladores já foram desenvolvidos para GC × GC. Inicialmente, eram utilizadas válvulas ou inserção direta na segunda coluna. Entretanto, para acumular os analitos em bandas estreitas no modulador tornou-se necessário utilizar gradientes térmicos, seja por temperaturas elevadas, para acelerar o soluto dentro de uma banda estreita (abordagem de varredura térmica – “thermal sweeper”), ou por sistemas criogênicos, para retardar os analitos e causar um aprisionamento na coluna, ou foco das bandas⁵. O primeiro sistema modulador criogênico foi descrito por Marriott e Kinghorn²⁶ e é chamado sistema criogênico longitudinalmente modulado (LMCS, “Longitudinally Modulated Cryogenic System”). Para LC × LC, é esperado que o modulador mais utilizado seja com válvula^{22,27,28}.

Período de modulação - P_M (“Modulation time or modulation period”) – corresponde à duração de um ciclo completo de modulação. É igual ao tempo entre duas injeções sucessivas na segunda dimensão².

Pico primário (“Parent peak”) – pico obtido por cromatografia monodimensional, que corresponde ao pico de origem dos picos modulados, obtidos por cromatografia multidimensional abrangente²⁹.

Picos modulados (“Modulated peaks”) – picos gerados pela separação que ocorra na segunda coluna, após o evento de modulação que, agrupados, representam o pico primário.

Diagrama tridimensional (“3D plot”) – gráfico tridimensional que representa uma separação bidimensional abrangente³⁰. Neste diagrama, o eixo X representa o tempo de retenção na primeira dimensão, o eixo Y, o tempo de retenção na segunda dimensão e o eixo Z, a intensidade de sinal. A Figura 1 apresenta uma região ampliada de

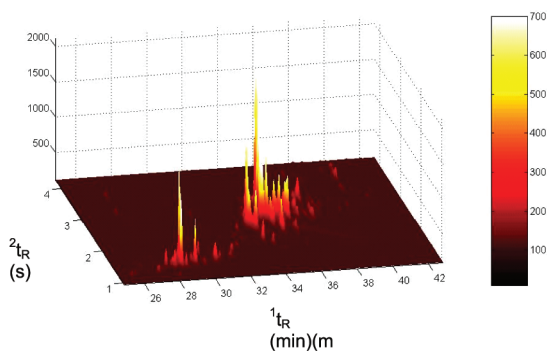


Figura 1. Região ampliada de um diagrama tridimensional obtido para uma separação realizada por GC × GC-FID de uma amostra de óleo de *Eucalyptus dunnii*

um diagrama tridimensional obtido para a análise por GC × GC-FID de uma amostra de óleo essencial de eucalipto, realizada na “Royal Melbourne University - RMIT”, na Austrália. Para esta separação foi utilizada uma coluna BXP-5 poli(5% fenil 95% metilsiloxano) de 30 m x 0,25 mm x 0,25 μm na primeira dimensão e uma coluna BP20 (polietilenoglicol) de 1,5 m x 0,1 mm x 0,1 μm na segunda dimensão. Foi utilizado um modulador LMCS (“Chromatography Concepts”, Doncaster, Austrália) ajustado para um P_M de 5s.

Diagrama de contorno (“Contour plot”) – gráfico bidimensional que apresenta uma separação bidimensional abrangente, onde as intensidades de sinal semelhantes são conectadas por uma linha, resultando em uma forma geométrica, que representa uma vista superior de parte de um pico cromatográfico. Neste e nos próximos diagramas, o eixo X representa o tempo de retenção na primeira dimensão e o eixo Y, o tempo de retenção na segunda dimensão. A Figura 2b apresenta um diagrama de contorno obtido para a mesma análise apresentada na Figura 1. Nos picos onde ocorre variação de intensidade de sinal, podem ser visualizadas várias formas geométricas concêntricas no diagrama de contorno. A Figura 2a mostra um cromatograma monodimensional da mesma amostra de óleo de eucalipto que aparece na Figura 1 e nos demais diagramas da Figura 2.

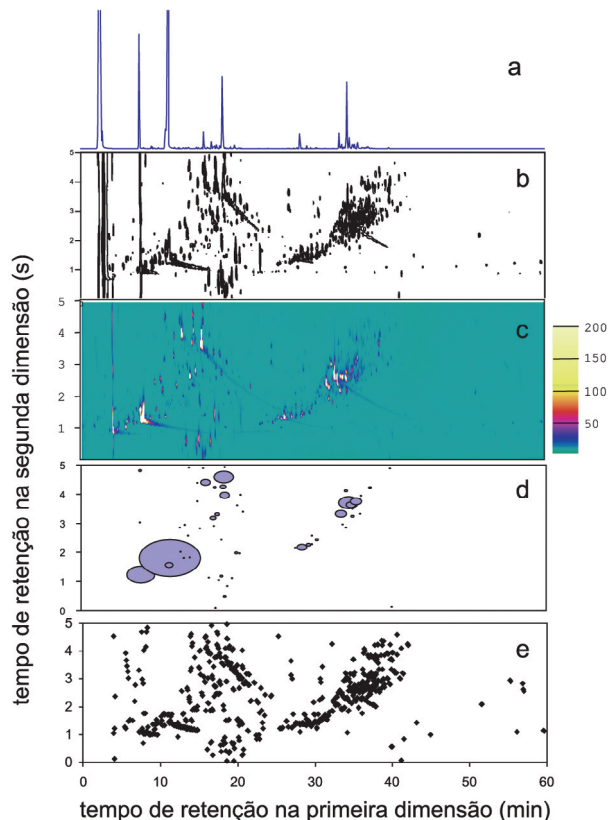


Figura 2. Cromatograma obtido por 1D GC (a) e diferentes representações para o espaço de separação de uma análise realizada por GC × GC para uma amostra de óleo essencial de *Eucalyptus dunnii*, onde: b - Diagrama de contorno; c - diagrama de cores; d - diagrama de bolhas e e - diagrama de ápices

Diagrama de cores (“Colour plot”) – gráfico bidimensional que apresenta uma separação bidimensional abrangente, onde as cores representam a intensidade do sinal de detecção. Na Figura 2c está ilustrado um diagrama de cores obtido para a mesma análise cromatográfica apresentada na Figura 2b. A escala de cores mostra que a intensidade do sinal cromatográfico varia de mais intenso (cores próximas ao

amarelo) ao menos intenso (cores próximas ao verde). Também aqui, cada mancha visualizada no diagrama de cores representa a vista superior de um pico cromatográfico em três dimensões.

Diagrama de bolhas (“Bubble plot”) – gráfico bidimensional que representa uma separação cromatográfica bidimensional abrangente, onde cada pico é representado por um círculo. A área de cada círculo correlaciona-se à medida quantitativa da soma das áreas dos picos modulados que geram o pico tridimensional³¹. O centro de cada círculo representa as coordenadas de tempo em cada dimensão. Um exemplo de diagrama de bolhas está ilustrado na Figura 2d para a mesma análise cromatográfica apresentada na Figura 2b.

Diagrama de ápices (“Apex plot”) – gráfico bidimensional que representa uma separação cromatográfica bidimensional abrangente, onde os máximos de cada pico são representados por símbolos³¹, como ilustrado na Figura 2e.

Espaço de separação (“Separation space”) – é a região no gráfico bidimensional de cromatografia multidimensional abrangente onde os compostos devem estar distribuídos.

Estrutura cromatográfica (“Chromatographic structure”) – refere-se ao ordenamento observado entre compostos quimicamente relacionados em um espaço de separação. Esta estrutura cromatográfica pode ser exemplificada pelo efeito telhado, conforme descrição a seguir.

Efeito telhado (“Roof-tile effect”) – perfil relativo ao agrupamento dos picos de uma classe de compostos quimicamente relacionados em um espaço de separação, o qual se repete quando o número de carbonos destes compostos aumenta ou diminui, de forma a causar uma impressão visual de “telhado” no gráfico bidimensional, sendo que cada conjunto alinhado de “telhas” corresponde a um grupo de compostos pertencentes a uma classe química que apresenta um determinado número de carbonos³². Esta distribuição espacial de “telhas” em seqüência no diagrama de contorno auxilia na identificação dos compostos e pode ser observada especialmente em amostras petroquímicas^{32,33}.

Fase da modulação - F_M - (“Modulation phase”) – definida pela relação entre os eventos de modulação e a distribuição do soluto entre os picos modulados. A fase de modulação é utilizada para ajustar a posição do máximo do pico relativamente aos eventos de modulação³⁴. A Figura 3 apresenta cromatogramas obtidos para os picos modulados de um composto, antes da conversão em diagrama de contorno ou outra representação gráfica. Para verificar a fase da modulação, os picos modulados são comparados a uma curva gaussiana.

Modulação em fase (“In-phase modulation”) – é a fase da modulação que produz uma seqüência simétrica de picos, apresentando um único pico mais intenso entre os picos modulados (Figura 3a). Quando a modulação está em fase, o tempo de retenção do pico primário está mais próximo do tempo de retenção do pico modulado mais intenso.

Modulação fora de fase (“Out-of-phase modulation”) – Qualquer fase que produz uma distribuição não simétrica dos picos modulados, em relação a um pico modulado central (Figura 3b e c). Quando os picos modulados estão distribuídos de forma simétrica, mas sem um pico central mais intenso, a modulação é chamada “180° fora de fase”, como ilustrado na Figura 3c.

Modulação de um estágio (“Single-stage modulation”) – com-

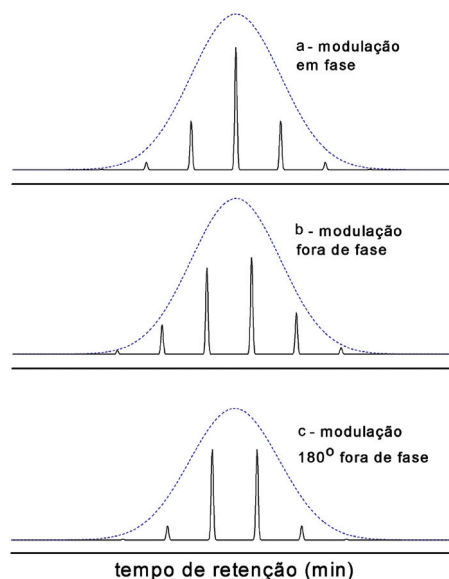


Figura 3. Esquema representando as fases de modulação, em comparação a uma curva gaussiana

pressão e/ou acumulação e injeção da banda cromatográfica através de uma série de processos em apenas um local no modulador.

Modulação de dois estágios (“Dual-stage modulation”) – compressão e/ou acumulação e injeção da banda em duas séries sucessivas de processos, em dois locais diferentes no modulador.

Ciclo de modulação (“Modulation cycle”) – compreende um evento de modulação completo.

Pico fora do ciclo (“Wrap-around”) – efeito observado quando um determinado composto apresenta um tempo de eluição na segunda coluna superior ao período de modulação. Por ex., um composto leva 7 s para eluir da segunda coluna, mas o período de modulação aplicado foi de 4 s. Como o gráfico bidimensional apresenta o tempo de retenção na segunda dimensão igual ao período de modulação, o pico não poderá aparecer com tempo de retenção na segunda dimensão superior a 4 s. Sendo assim, este composto aparecerá no próximo ciclo de modulação, com tempo de retenção na segunda dimensão de $(7 - 4) 3$ s (Figura 4b, pico M). O 2t_R do composto será sempre dado pelo 2t_R encontrado no gráfico bidimensional + (número de ciclos $\times P_M$). Para o exemplo dado, ${}^2t_R = 3 \text{ s} + 1 \times 4 \text{ s} = 7 \text{ s}$.

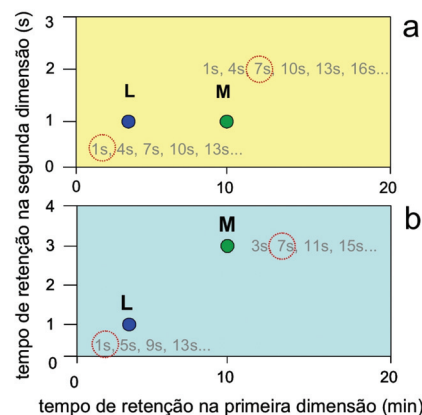


Figura 4. Representação do efeito de pico fora do ciclo para um período de modulação de A - 3 s e B - de 4 s, utilizando-se dois compostos genéricos L e M

Se o P_M for muito menor que o 2t_R , o pico poderá estar fora do ciclo por mais de um ciclo de modulação. Para determinar o número de ciclos do pico, costuma-se analisar o mesmo composto usando-se dois períodos de modulação distintos, como ilustrado na Figura 4. O composto L apresentou o mesmo 2t_R no gráfico bidimensional para 3 e 4 s de modulação, conforme Figuras 4a e 4b, respectivamente. Logo, este composto pode estar eluindo da segunda dimensão em 1 s, ou em 13 s, o que seria o próximo 2t_R igual para os dois períodos de modulação testados, já que o tempo de eluição do composto será o mesmo, independente do período de modulação aplicado. Neste caso, a possibilidade do pico estar fora do ciclo é muito pequena. Já para o composto M, o 2t_R apresentado nas Figuras 4a e 4b é diferente para os dois P_M aplicados, sugerindo que este pico está fora do ciclo. Sendo assim, o 2t_R para o composto M não poderá ser 1 s, e o próximo ciclo de modulação, para o P_M de 3 s, seria $3 + 1 = 4$ s. Se o 2t_R fosse 4 s, este pico estaria eluindo em 4 s para o P_M de 4 s. Logo, o próximo 2t_R coerente com os dois diagramas de contorno seria $3+3+1 = 7$ s. Neste caso, o pico do composto M estaria fora de ciclo por um ciclo de modulação para o P_M de 4s, e por dois ciclos para o P_M de 3s.

Conjunto de colunas (“Column set”) – a combinação de colunas utilizada para um determinado experimento em cromatografia multidimensional abrangente.

Razão das seções transversais de área do conjunto de colunas (“Column set cross sectional area ratio”) – mudança relativa da seção transversal de área das colunas de 1D para 2D , que é expressa como ${}^1D/{}^2D$.

Focalização (“Focusing effect”) – redução da largura da banda cromatográfica (em unidades de tempo, distância e/ou volume). É a razão entre a largura da banda sem modulação e a largura da banda com modulação.

Compressão de zona (“Zone compression”) – o efeito de reduzir a largura de um pico cromatográfico no espaço ou no tempo de forma a resultar em maior concentração do(s) componente(s) do mesmo dentro da coluna cromatográfica.

GC × GC com fluxo intermitente (“stop-flow GC × GC”) – modalidade de cromatografia gasosa bidimensional abrangente onde o fluxo da fase móvel é interrompido em cada ciclo de modulação, permitindo uma separação na segunda dimensão independente do ciclo de modulação^{35,36}.

SÍMBOLOS

Alguns símbolos utilizados especificamente para cromatografia multidimensional abrangente, especialmente em técnicas bidimensionais estão apresentados na Tabela 2.

CONCLUSÃO

Neste trabalho foi apresentada uma proposta de nomenclatura para a área de cromatografia multidimensional abrangente em língua portuguesa, a qual foi adaptada da terminologia atualmente empregada na literatura internacional, com vistas à promoção de uma linguagem uniforme, concisa e clara. Tendo em vista a crescente utilização da cromatografia bi- e multidimensional em todo o mundo, é expectativa dos autores que esta proposta de uniformização da terminologia nesta área possa auxiliar na comunicação entre pesquisadores e demais profissionais da área no Brasil, bem como assistir na disseminação da técnica entre profissionais das várias áreas do conhecimento.

Tabela 2. Lista de símbolos adotados em cromatografia bidimensional abrangente²

${}^1D, {}^2D$	Primeira dimensão e segunda dimensão, respectivamente
${}^1d_c, {}^2d_c$	Diâmetros internos das colunas da primeira e da segunda dimensão, respectivamente
${}^1d_f, {}^2d_f$	Espessuras dos filmes da primeira e da segunda coluna, respectivamente, para colunas tubulares abertas (GC)
${}^1d_p, {}^2d_p$	Diâmetro de partícula da primeira e da segunda coluna, respectivamente, para colunas recheadas (LC)
f_M	Frequência de modulação – número de modulações por unidade de tempo, normalmente expressa em modulações por min
${}^1I, {}^2I$	Índices de retenção de um pico eluído da primeira e da segunda coluna, respectivamente
${}^1k, {}^2k$	Fatores de retenção de um pico eluído da primeira e da segunda dimensão, respectivamente
${}^1N, {}^2N$	Números de pratos da primeira e da segunda dimensão, respectivamente.
${}^1n, {}^2n$	Capacidades de picos da primeira e da segunda coluna, respectivamente. Entende-se por capacidade de picos o número máximo de componentes que podem ser separados em um determinado intervalo de tempo, com uma resolução específica ³⁷
n_M	Número de modulação - número de modulações obtidas para um determinado pico primário
${}^1R_s, {}^2R_s$	Valores de resolução de um par de picos eluídos da primeira e da segunda dimensão, respectivamente
${}^1T_e, {}^2T_e$	Temperaturas de eluição de um pico eluído da primeira e da segunda dimensão, respectivamente
${}^1t_M, {}^2t_M$	Tempos de retenção de um composto não retido pela fase estacionária da primeira e da segunda dimensão, respectivamente
${}^1t_R, {}^2t_R$	Tempos de retenção de um pico na primeira e na segunda dimensão, respectivamente
${}^1\bar{u}, {}^2\bar{u}$	Velocidades lineares médias na primeira e na segunda dimensão, respectivamente
${}^1w_b, {}^2w_b$	Largura do pico na linha de base dos picos eluídos na primeira e na segunda dimensão, respectivamente
${}^1\sigma, {}^2\sigma$	Desvios padrões dos picos eluídos da primeira e da segunda dimensão, respectivamente
τ_z	Período de amostragem adimensional, definido como a razão entre o período de amostragem do modulador e o desvio padrão do pico primário ³⁸

a) Símbolo retirado da ref. 29.

REFERÊNCIAS

- von Mühlen, C.; Zini, C. A.; Caramão, E. B.; Marriott, P. J.; *Quim. Nova* **2006**, *29*, 765.
- Schoenmakers, P. J.; Marriott, P. J.; Beens, J.; *LCGC Eur.* **2003**, *1*.
- Liu, Z. Y.; Phillips, J. B.; *J. Chromatogr. Sci.* **1991**, *29*, 227.
- de Geus, H. J.; Boer, J.; Brinkman, U. A. Th.; *TrAC, Trends Anal. Chem.* **1996**, *15*, 168.
- Marriott, P. J.; Shellie, R.; *TrAC, Trends Anal. Chem.* **2002**, *21*, 573.
- Ettre, L. S.; *Pure Appl. Chem.* **1993**, *65*, 819.
- McNaught, A. D.; Wilkinson, A.; *IUPAC Compendium of Chemical Terminology*, 2nd ed, Blackwell Science: Cambridge, 1997.
- <http://www.chemsoc.org/chembytes/goldbook/>, acessada em Abril 2005.
- Santiuste, J. M.; Takacs, J. M.; *J. Chromatogr. A* **2002**, *966*, 145.
- Murray, K. K.; Boyd, R. K.; Eberlin, M. N.; Langley, G. J.; Li, L.; Naito, Y.; Tabet, J. C.; *IUPAC MS Terms and Definitions, First Public Draft, June 2005*, em www.msterms.com.
- Collins, C. H.; Berg, R. G.; Valente, A. L. P.; Kugler, W.; Murta, A. L. M.; *Quim. Nova* **1982**, *5*, 115.

12. Collins, C. H.; de Aquino Neto, F. R.; da Silva, J. R. P.; *Quim. Nova* **1988**, *11*, 443.
13. Collins, C. H.; de Aquino Neto, F. R.; da Silva, J. R. P.; *Quim. Nova* **1989**, *12*, 92.
14. Giddings, J. C.; *Anal. Chem.* **1984**, *56*, 1258A.
15. Boggess, B.; *J. Chem. Educ.* **2001**, *78*, 168.
16. Sparkman, O. D.; *Mass Spectrometry Desk Reference*, Global View Publishing: Pittsburg, 2000.
17. www.agilent.com, acessada em Março 2006.
18. www.thermo.com, acessada em Março 2006.
19. <http://www1.shimadzu.com/products/lab/mass/a.html>, acessada em Março 2006.
20. Houaiss, A.; Salles, M. V.; *Dicionário Houaiss da Língua Portuguesa*, 1ª ed., Ed. Objetiva: Rio de Janeiro, 2001.
21. Ryan, D.; Morrison, P. D.; Marriott, P.; *J. Chromatogr., A* **2005**, *1071*, 47.
22. Schoenmakers, P. J.; Vivó-Truyols, G.; Decrop, W. M. C.; *J. Chromatogr., A* **2006** *1105*, 282.
23. van der Host, A.; Schoenmakers, P. J.; *J. Chromatogr., A* **2003**, *1000*, 693.
24. Janssen, H. G.; Boers, W.; Steenbergen, H.; Horsten, R.; Flöter, E.; *J. Chromatogr., A* **2003**, *1000*, 385.
25. Moore Jr., A. W.; Jorgenson, J. W.; *Anal. Chem.* **1995**, *67*, 3456.
26. Marriott, P. J.; Kinghorn, R. M.; *Anal. Chem.* **1997**, *69*, 2582.
27. Bushey, M. M.; Jorgenson, J. W.; *Anal. Chem.* **1990**, *62*, 161.
28. Murahashi, T.; *Analyst* **2003**, *128*, 611.
29. Seeley, J. V.; *J. Chromatogr., A* **2002**, *962*, 21.
30. Dallüge, J.; Beens, J.; Brinkman, U. A. Th.; *J. Chromatogr., A* **2003**, *1000*, 69.
31. Shellie, R.; Marriott, P. J.; Huie, C. W.; *J. Sep. Sci.* **2003**, *26*, 1185.
32. Beens, J.; Blomberg, J.; Schoenmakers, P. J.; *J. High Resol. Chromatogr.* **2000**, *23*, 182.
33. von Mühlen, C.; Zini, C. A.; Caramão, E. B.; Marriott, P. J.; *J. Chromatogr., A* **2006**, *1105*, 39.
34. Ong, R. C. Y.; Marriott, P. J.; *J. Chromatogr. Sci.* **2002**, *40*, 276.
35. Harynuk, J.; Górecki, T.; *J. Sep. Sci.* **2004**, *27*, 431.
36. Harynuk, J.; Górecki, T.; *J. Chromatogr., A* **2006**, *1105*, 159.
37. Shellie, R.; Marriott, P. J.; *Flavour Frag. J.* **2003**, *18*, 179.