

## Química analítica verde: avaliação de métodos analíticos segundo métricas sustentáveis

### Green Analytical Chemistry: assessment of analytical methods by sustainable metrics

Cícera Meili de Britto do Nascimento<sup>1</sup>, Maria Fatima Ludovico de Almeida<sup>2</sup>,  
Rogério Mesquita de Carvalho<sup>3</sup>

<sup>1</sup> PUC-Rio; <sup>2</sup> PUC-Rio; <sup>3</sup> Petrobras

E-mail: cicera2003@gmail.com; fatima.ludovico@puc-rio.br; rmc@petrobras.com.br

**Resumo:** O objetivo deste artigo é apresentar uma metodologia de avaliação de métodos de Química Analítica, cuja aplicabilidade foi demonstrada por um estudo de caso desenvolvido em um centro de P&D de uma grande empresa do setor petróleo, gás natural e biocombustíveis. Considera-se de fundamental importância a reflexão crítica por parte das instituições de Ciência & Tecnologia e empresas da indústria de processo sobre os métodos de Química Analítica que vêm adotando, no sentido de passarem a empregar métodos analíticos mais ‘verdes’.

**Palavras-chave:** metrologia; química analítica verde; avaliação da graduação verde; métricas sustentáveis.

**Abstract:** This article aims to present an integrated approach to assess chemical analytical methods by sustainable metrics, applied by a R&D Laboratory of a large oil, natural gas and biofuels company. The central question motivating the proposed research was the potential of development and adoption of green analytical methods by Science & Technology institutions and companies working in process industries, particularly chemicals, building materials, pulp and paper, oil and gas, and their respective subsectors.

**Keywords:** Metrology; green analytical chemistry; greenness assessment; sustainable metrics.

## 1. INTRODUÇÃO

Tanto no contexto de avaliação da conformidade das práticas laboratoriais aos requisitos das normas aplicáveis, quanto na gestão de Segurança, Meio Ambiente e Saúde (SMS), métodos e procedimentos de Química Analítica constituem importantes ferramentas para determinar a qualidade do ar, da água e do solo, sendo também indispensáveis na obtenção de dados necessários para o desenvolvimento de

modelos voltados para a decomposição de moléculas sintéticas tóxicas. Por outro lado, podem também causar danos ao ecossistema, pela utilização de reagentes tóxicos, geração de resíduos ou consumo elevado de energia.

Frente ao exposto, considera-se de fundamental importância a reflexão crítica por parte das instituições de Ciência & Tecnologia (ICT) e empresas da indústria de processo sobre os métodos de Química Analítica que vêm adotando, no sentido de passarem a empregar

métodos analíticos mais ‘verdes’. Essas instituições e empresas devem avaliar de forma sistemática os riscos inerentes a alguns tipos de amostras, o uso elevado de reagentes e solventes químicos, o alto consumo de energia associado à automação, além da geração de resíduos e emissões poluentes resultantes das várias etapas dos processos quimioanalíticos.

Essa foi a principal questão que motivou o desenvolvimento da pesquisa que originou este artigo e que teve como objetivo principal propor e aplicar uma metodologia integrada de avaliação de métodos de Química Analítica, ilustrando-se com um estudo de caso desenvolvido no âmbito do centro de P&D de uma grande empresa do setor petróleo, gás natural e biocombustíveis (Nascimento, 2014).

## 2. REFERENCIAL TEÓRICO

O referencial teórico da pesquisa que deu origem a este artigo compreendeu os seguintes temas: (i) sustentabilidade corporativa e criação de valor sustentável (Hart e Milstein, 2003; Porter e Kramer, 2006); (ii) Química Analítica Verde (Armenta, Garrigues e Guardia, 2008; Guardia e Garrigues, 2012); e (iii) ferramentas de avaliação do ‘perfil verde’ de métodos de Química Analítica, concebidas e implementadas na última década em nível internacional (Nascimento, 2014).

## 3. METODOLOGIA

De acordo com a taxonomia proposta por Vergara (2002), a pesquisa pode ser considerada, quanto aos fins, aplicada, descritiva e metodológica. Quanto aos meios de investigação, foram utilizados os seguintes métodos: pesquisa bibliográfica, pesquisa documental, pesquisa de campo e estudo de caso.

O estudo de caso foi desenvolvido em sete etapas, a saber: (i) definição das questões do estudo de caso; (ii) seleção do tipo de estudo; (iii) delimitação e caracterização da unidade de

análise e seu contexto organizacional; (iv) elaboração da ferramenta para a pesquisa de campo (formulários para a coleta de dados e para a avaliação dos métodos); (v) coleta, formatação e análise dos dados; (vi) descrição e discussão dos resultados, com proposições de modificações em métodos tradicionais ou desenvolvimento/adoção de novos métodos analíticos; e (vii) elaboração das conclusões do estudo de caso (Yin, 2005).

## 4. ABORDAGEM INTEGRADA PARA AVALIAÇÃO DE MÉTODOS DE QUÍMICA ANALÍTICA

Propõe-se uma abordagem integrada de avaliação dos ‘perfis verdes’ de métodos analíticos, inspirada fundamentalmente no esquema apresentado por Guardia e Garrigues (2012). Em relação à proposição original desses autores, substituíram-se os pictogramas complementares ao pictograma NEMI pelos apresentados na Figura 1 (pictogramas ‘Estrela Verde’ e ‘Pentágono Verde’, respectivamente).

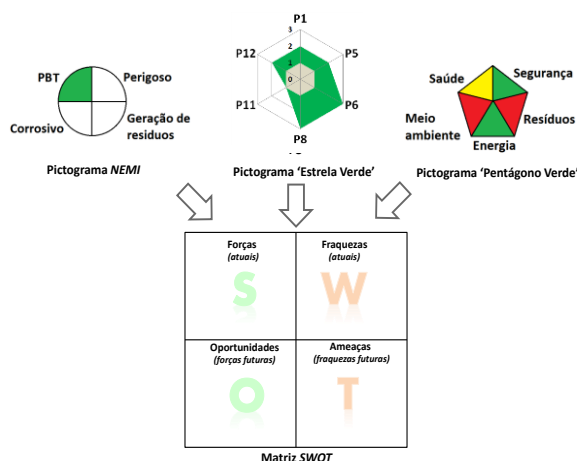
A aplicação da abordagem integrada consiste das seguintes etapas: (i) identificação dos métodos analíticos empregados pela unidade organizacional em foco, que deverão ser objeto da avaliação de ‘perfis verdes’; (ii) consulta à base de dados NEMI, à lista *PBT – TRI* e a *List of Lists*, ambas divulgadas pela US EPA, para classificar os métodos em relação aos quatro critérios do pictograma NEMI; (iii) consulta às escalas de pontuação definidas por Ribeiro, Costa e Machado (2010) para classificar os métodos em relação aos princípios da QV aplicáveis à QAV e construir o pictograma ‘Estrela Verde’; (iv) consulta às escalas de pontuação definidas por Driver (2009) e a referenciais normativos como o guia NFPA 704, publicado pela *National Fire Protection Association* (2012); à lista *PBT – TRI* e à *List of Lists*, ambas publicadas pela US EPA; (v) classificação dos métodos em relação aos critérios do pictograma ‘Pentágono Verde’; (vi) análise conjunta dos três pictogramas (NEMI,

‘Estrela Verde’ e ‘Pentágono Verde’) de cada método para indicação (ou não) da análise SWOT; (vii) construção da matriz SWOT para os métodos analíticos considerados ‘menos verdes’, visando identificar as forças e fraquezas atuais associadas ao método e as oportunidades e ameaças potenciais, que poderão se transformar em forças e fraquezas no futuro; e (viii) consolidação da avaliação integrada dos métodos analíticos e elaboração de plano de ação para melhoria dos atuais ‘perfis verdes’, incluindo proposição de desenvolvimento de novos métodos analíticos verdes, quando aplicável.

A seguir, apresenta-se uma aplicação da metodologia integrada de avaliação de métodos de Química Analítica, realizada durante o desenvolvimento do estudo de caso em um centro de P&D de uma grande empresa do setor petróleo, gás natural e biocombustíveis.

A Figura 1 ilustra a aplicação da abordagem integrada para avaliação do método de extração líquido-líquido.

**Figura 1.** Abordagem integrada para avaliação do método de extração líquido-líquido



#### 4.1 Avaliação segundo o Pictograma NEMI

O método de extração líquido-líquido, analisado de acordo com os critérios NEMI, apresenta somente um dos quadrantes do pictograma na cor verde. Esse método não emprega substâncias da lista PBT-TRI, da US EPA. Com relação ao

quadrante ‘geração de resíduos’, o volume total de solventes utilizados é da ordem de 200 ml. Todo esse volume é evaporado ao término da extração e vai para a atmosfera. Adicionalmente, o volume da amostra se situa entre 100 e 200 ml. O pictograma NEMI pode ser visualizado à esquerda na Figura 1.

#### 4.2 Avaliação segundo o Pictograma ‘Estrela Verde’

O método de extração líquido-líquido foi avaliado segundo a ferramenta “Estrela Verde”, tendo como resultado geral um índice de preenchimento da estrela verde (IPEV) de 58%. Esse índice traduz as seguintes características do método: (i) é realizado em temperatura e pressão ambientes; (ii) não se usa derivatizantes; (iii) o volume de solventes empregado é evaporado ao término da extração e vai para a atmosfera; (iv) utiliza o solvente diclorometano, classificado pelo *Hazard Codes* como Xn para o risco “Saúde”, ou seja, risco moderado; e (v) não ocorre monitoramento e controle em tempo real em tempo real para prevenção de poluição. O pictograma da ‘Estrela Verde’ é representado ao centro da Figura 1.

#### 4.3 Avaliação segundo o Pictograma ‘Pentágono Verde’

O método de extração líquido-líquido obteve pontuação máxima em relação a dois critérios deste pictograma (‘segurança’ e ‘energia’). As pontuações mais baixas referem-se aos critérios ‘meio ambiente’ e ‘resíduos’. O método utiliza apenas funil de separação e balança analítica. Consumo de energia é inferior a 0,1 KWh. O volume total de solventes utilizado é da ordem de 200 ml (corresponde a 264 g). O solvente diclorometano consta da Lista *Comprehensive Environmental Response, Compensation and Liability Act* (CERCLA), mas não consta da lista *Regulated Chemicals For Accidental Release Prevention*. O volume total de solventes utilizado é da ordem de 200 ml, que corresponde a 264 g. Sendo superior a 250g, corresponde ao grau 3 no

item “Meio Ambiente”. O código NFPA 704 do solvente empregado apresenta grau 2 em relação ao item ‘Saúde’. O código NFPA 704 do solvente diclorometano apresenta grau 0 nos quadrantes ‘Inflamabilidade’ e ‘Reatividade’. A representação do pictograma pode ser visualizada à direita na Figura 1.

#### 4.4 Matriz SWOT

Segundo a avaliação conjunta dos três pictogramas, o método de extração líquido-líquido tem como pontos fracos o emprego de elevado volume de solventes, a demanda constante de manipulação da amostra pelo analista e a geração de resíduos com impactos potenciais ao meio ambiente. Tem como pontos fortes a realização em temperatura e pressão ambientes e o não uso de derivatizantes. Buscou-se identificar na literatura especializada alternativas verdes para esse método, destacando-se a extração em fase sólida; a microextração em fase sólida por ser um método rápido e livre de solventes; e a extração por sorção em barra magnética (SBSE).

### 5. CONCLUSÕES

Concluiu-se que o desenvolvimento e aplicação de métricas holísticas e integradas em uma única abordagem conceitual – como proposto neste artigo – constituem pilares para o avanço da Química Analítica Verde. Permitem visualizar facilmente o alinhamento de cada método analítico aos princípios da QV aplicáveis à QAV. Fornecem critérios objetivos e métricas para classificar os métodos, segundo escalas de graduação verde (*greenness*) e contribuem para o fortalecimento de uma atitude proativa e preventiva em relação às questões de segurança, meio ambiente, saúde ocupacional e eficiência energética.

### 6. REFERÊNCIAS

Armenta, S.; Garrigues, S.; Guardia, M. De La. Green analytical chemistry. *Trends in Analytical Chemistry*, v.27, p.497-511. 2008.

Driver, J. L. *Investigations into chemical analysis: assessing greenness, quantifying isomers, and modeling diffusion*. 2009. 153 p. Thesis (PhD). Department of Chemistry and Biochemistry. South Dakota State University, South Dakota, 2009.

Guardia, M. De La; Garrigues, S. (Orgs.) *Handbook of green analytical chemistry*. New York: John Wiley & Sons, Ltd. 2012.

Hart, S.; Milstein, M. Creating sustainable value. *Academy of Management Executive*, v.17, n.2, p. 56-68, 2003.

Nascimento, C. M. B. *Química analítica verde: uma abordagem qualitativa e integrada para avaliação de métodos analíticos segundo métricas sustentáveis*. Rio de Janeiro, 2014, 115 p. Dissertação (Mestrado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

National Environmental Methods Index. NEMI. *Methods databank*. 2015. Disponível em: <<http://www.nemi.gov>>. Acesso em 13 jul. 2015.

National Fire Protection Association. *NFPA 704: Standard system for the identification of the hazards of materials for emergency response*. Washinton, D.C.: NFPA, 2012.

Porter, M. E.; Kramer, M.R. Strategy and society: the link between competitive advantage and corporate social responsibility. *Harvard Business Review*, December 2006, p. 1-14. 2006.

Ribeiro, M.G.T.C.; Costa, D.A.; Machado, A. S. C. Uma métrica gráfica para avaliação holística da verdure de reações laboratoriais – “estrela verde”. *Química Nova*, v.33, n.3, p.759-764, 2010.

Vergara, S.C. *Metodologia do trabalho científico*. 22ª ed. São Paulo: Cortez. 2002.

Yin, R. K. *Estudo de caso: planejamento e métodos*. 3ª ed. Porto Alegre: Bookman, 2005.