



Química Verde na Derivatização de Subprodutos da Desinfecção: Uma Abordagem com Ácidos de Keggin

Amanda A. Fernandes (PG)^{1*}; Ana Carolina Pereira Paiva (PQ)²; André Fernando de Oliveira (PQ)³

^{1*}amanda.a.fernandes@ufv.br. ¹²³ Universidade Federal de Viçosa (UFV)

RESUMO

Este estudo investiga o uso de heteropoliácidos do tipo Keggin como alternativa sustentável aos ácidos fortes tradicionais na derivatização de ácidos haloacéticos (AHAs), subprodutos tóxicos da cloração da água. Foram testadas diferentes concentrações do catalisador e do analito, com reações conduzidas em metanol a 100 °C e analisadas por GC-MS. O ácido de Keggin demonstrou eficiência na formação do derivado esterificado, viabilizando a reação sob condições mais seguras. A abordagem está alinhada aos princípios da Química Verde e aos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS), especialmente os ODS 6, 9 e 12. A ferramenta AGREEprep foi aplicada para avaliar a sustentabilidade da metodologia, indicando resultados promissores. Os dados obtidos contribuem para o desenvolvimento de métodos analíticos mais limpos e seguros, reforçando a aplicabilidade dos heteropoliácidos na química ambiental.

Palavras-chave: Esterificação; Ácidos de keggins; Ácidos haloacéticos, Água; Derivatização.

Introdução

A química verde pode ser compreendida como uma abordagem que reúne princípios voltados à diminuição ou remoção do uso e da formação de compostos nocivos durante o desenvolvimento, produção e utilização de substâncias químicas. Essa perspectiva se baseia na ideia fundamental de que os profissionais da química devem buscar tornar suas atividades o mais seguras possíveis. Com o conhecimento sobre como modificar e manipular compostos, os químicos detêm a capacidade de minimizar os riscos, tanto para si próprios quanto para a sociedade em geral¹. Além disso, ao adotar estratégias de química verde, é possível contribuir diretamente para diversos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) da Agenda 2030 da ONU, promovendo uma ciência mais responsável, segura e alinhada às demandas ambientais e sociais contemporâneas². Dentro desse cenário, destaca-se a necessidade de minimizar também a formação de subprodutos tóxicos em processos industriais e ambientais, como os gerados no tratamento convencional de água potável. Entre as etapas críticas deste processo, a cloração pode resultar na formação de compostos não desejados, conhecidos como subprodutos da desinfecção (DBPs), entre os quais se destacam os ácidos haloacéticos (AHAs) e os trihalometanos (THMs)³, ambos sujeitos à regulamentação pela Portaria GM/MS nº 888/2021 do Ministério da Saúde⁴. Neste estudo, foi investigado o uso de heteropoliácidos do tipo Keggin como fontes alternativas de íons hidrogênio para a derivatização de AHAs, em substituição aos ácidos fortes comumente utilizados em procedimentos convencionais.

Experimental

Para a avaliação da eficiência de heteropoliácidos do tipo Keggin como fontes alternativas de prótons na derivatização de ácidos haloacéticos (AHAs), foram preparados diferentes sistemas reacionais. A metodologia consistiu na utilização de três massas do ácido de Keggin (20 mg e 90 mg), que foram adicionadas a soluções contendo ácido tricloroacético (CCl₃COOH) em metanol (CH₃OH). As concentrações avaliadas do analito variaram em 10 mg/L, 30 mg/L e 50 mg/L. Os ensaios foram conduzidos em banho de glicerina sob aquecimento controlado de 100°C, com tempos de reação de 1 e 8 h. Após o processo de derivatização, as amostras foram diluídas em metanol, filtradas em PTFE 0,45µm e, posteriormente, analisadas por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (GC-MS).

Resultados e Discussão

Os resultados obtidos demonstraram a formação do éster de interesse, sob ação do catalisador. Observou-se uma dependência da constante de velocidade observada (k_{obs}) com a concentração do analito, considerando-se o modelo cinético de pseudo-primeira ordem (Figura 1), o que permitiu estimar parâmetros relevantes para a otimização da reação.

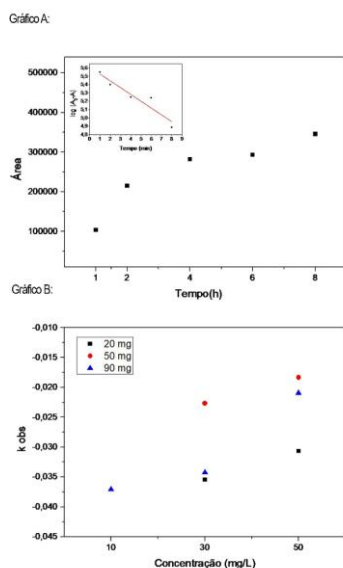


Figura 1. Comportamento cinético observado (A) Exemplo da Area cromatográfica do ester formado em função do tempo. Inserto: gráfico linearizado da cinética de 1ª ordem. (B) Comportamento da constante cinética observada em função da concentração de ácido tricloroacético e da dose de catalisador.

O uso do ácido de Keggin se mostrou eficaz como fonte alternativa de prótons, substituindo ácidos fortes tradicionalmente empregados, como o ácido clorídrico ou sulfúrico, contribuindo assim para o desenvolvimento de um método mais seguro, e ambientalmente sustentável comparado aos métodos tradicionais. Essa abordagem está diretamente alinhada aos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS), especialmente ao ODS 6 - Água potável e saneamento, com metodologias de análises mais eficientes e eficazes. No contexto do ODS 9 - Indústria, inovação e infraestrutura, destaca-se a proposta de um método mais inovador, com menor dependência de reagentes perigosos. Por fim, o ODS 12 - Consumo e produção responsáveis é contemplado pela substituição de ácidos fortes e menos agressivos ao meio ambiente, reforçando o compromisso com práticas laboratoriais mais limpas e conscientes (Figura 2). Ademais, o método desenvolvido foi avaliado quanto à sua sustentabilidade utilizando a ferramenta, Assessment of Greenness of the Sample PREparation (AGREEprep), apresentando resultados satisfatórios quando comparados ao método tradicional dentro dos princípios da Química Verde (Figura 3). É importante ressaltar que, estudos continuam sendo realizados com o objetivo de aprimorar ainda mais a metodologia e aprofundar a compreensão do sistema e do comportamento dos ácidos de Keggin.



Figura 2. ODS contempladas na utilização de catalisadores de Keggin.

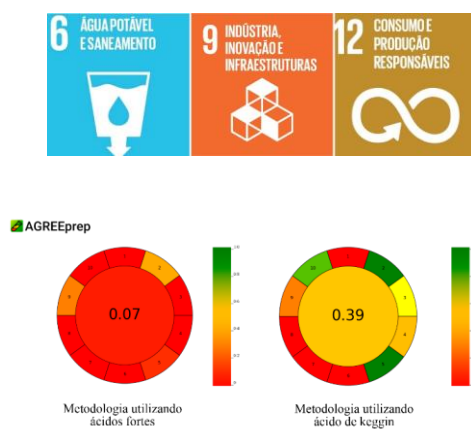


Figura 3. Gráficos gerados pela ferramenta |AGREEprep| para avaliação dos métodos de derivatização de AHAs.

Conclusões

Os resultados experimentais demonstraram que o ácido de Keggin promoveu de forma eficiente a esterificação do ácido tricloroacético com metanol, evidenciando sua atuação como catalisador prático viável. Além disso, o uso desse catalisador está alinhado com os princípios da Química Verde, por reduzir o uso de reagentes tóxicos ou corrosivos e reduzir a geração de resíduos, propondo uma alternativa mais limpa, segura e sustentável para processos de síntese química.

Agradecimentos

Ao Programa de Pós-Graduação Multicêntrico em Química, Laboratório de Química Analítica (LAQUA), Consórcio Intermunicipal De Saneamento Básico Da Zona Da Mata De Minas Gerais (CISAB), Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), e a Universidade Federal de Viçosa.

Referências

1. P. T. Anastas; J. C. Warner. *Química Verde Teoria e Prática*, Ed.; Editora Unesp, São Paulo, **2025**; Vol.1, 11- 159.
2. Nações Unidas. *Objetivos de Desenvolvimento Sustentável*. ONU Brasil. Disponível em: <https://brasil.un.org/pt-br/sdgs>. Acesso em: 25 jun. 2025.
3. U.S. Environmental Protection Agency. *National Primary Drinking Water Regulations*. United States, 1976.
4. Ministério Da Saúde. *Portaria GM/MS nº 888, de 4 de maio de 2021. Dispõe sobre os padrões de qualidade da água para consumo humano*. Brasília, DF: Diário Oficial da União, [2021] .Disponível em: <https://www.gov.br/saude/pt-br>. Acesso em: 30 dez. 2024

Comentado [ACP2]: "...para avaliação dos métodos de derivatização de AHAs"

Comentado [ACP1]: O método é melhor assim, mas pode melhorar mais, principalmente olhando pelos resultados do AGREE