

ABRIL/91

VOL. 14 Nº 2 - SUPLEMENTO

ISSN 0100-4042

química nova

Órgão de divulgação da SBQ - Publicação Trimestral

SBQ

Sociedade Brasileira de Química

RESUMOS

14ª Reunião Anual

15 a 18 de maio de 1991

Caxambu - Minas Gerais

IDENTIFICAÇÃO DE HIDROCARBONETOS AROMÁTICOS POLINUCLEADOS EM AMOSTRAS DE PETRÓLEO BRASILEIRO Cláudia Alcaraz Zini e Elina Bastos Caramão (Instituto de Química, UFRGS, Porto Alegre, RS)

É reconhecida a ação carcinogênica dos Hidrocarbonetos Aromáticos Polinucleados (PAHs), especialmente a dos derivados de combustíveis fósseis. Tais compostos assumem grande importância quando do craqueamento do petróleo em refinarias. Nestes processos os PAHs produzidos podem ser liberados junto com a fumaça ou concentrados nos resíduos pesados das torres de destilação a vácuo. Em qualquer dos casos, o potencial poluente é bastante elevado. Em relação ao teor de PAHs no petróleo brasileiro, pouco se conhece. A determinação deste teor e a identificação dos principais PAHs no petróleo brasileiro é de fundamental importância a fim de preservar o meio ambiente e, em paralelo, desenvolver rotas de transformação que viabilizem o uso deste material. No presente trabalho estudou-se uma amostra de petróleo brasileiro de Cabiúnas, Bacia de Campos, Rio de Janeiro, cedida pela PETROBRÁS. Esta amostra foi fracionada por cromatografia líquida preparativa, fornecendo duas frações de aromáticos (ARO I e ARO II). Estas frações foram caracterizadas por Análise Elemental, Infravermelho, Ressonância Magnética Nuclear, Cromatografia Gasosa e Espectroscopia de Massas. Encontraram-se teores bastante elevados de PAHs (9,32% ARO I e 4,94% ARO II) e foram identificados vários PAHs, como criseno, pireno, fluoreno, benzo-pireno e outros.

QA-118

ESTUDO DE AMOSTRAGEM-CONCENTRAÇÃO E "CLEAN-UP" DE PAHs EM ÁGUA UTILIZANDO RESINAS C-18 E XAD-2.

Wagner Roberto Trevelin, Luiz Hernando Vidal, Maria Diva Landgraf e Maria Olímpia de Oliveira Rezende - Instituto de Física e Química de São Carlos/ Universidade de São Paulo/ Departamento de Química e Física Molecular.

Alguns Hidrocarbonetos Poliaromáticos Nucleares (PAHs) como Benzo(a)Antraceno, Benzo(a)Pireno e Dibenz(a,h)Antraceno são potentes agentes carcinogênicos.

As fontes de PAHs são queimadas, combustão de motores de automóveis, fumaça de cigarros, queima de carvão entre outras. O estudo da identificação e quantificação de compostos orgânicos em matrizes aquosas é necessário para resolver vários problemas ambientais, um dos quais é o da caracterização química destes compostos.

A determinação dos PAHs a baixas concentrações foi estudada utilizando-se uma resina de fase reversa quimicamente ligada (C-18) em sistema de Extração em Fase Sólida (SPE). Analisou-se amostras de água destilada dopadas com poluentes orgânicos: uma mistura de 16 PAHs além de hidrocarbonetos de C15 a C20, 2-octanona, 1-octanol, 2,6-dimetilanilina e 2,6-dimetilfenol. Inicialmente procedeu-se a um "Clean-Up". Este "Clean-Up" foi baseado na adsorção cromatográfica em resinas XAD-2 e na eluição seletiva com etanol (fração polar), n-pentano (fração apolar) e acetato de etila (PAHs). A eficiência da separação seletiva deste procedimento foi por cromatografia gasosa capilar. Utilizou-se várias colunas cromatográficas para as análises das frações, tais como HP-1, SP-2100 e HP-5. Os melhores resultados foram obtidos com uma coluna capilar Ultra-1 (Metil-Siloxano Cross-Linked) de 25 m, 0,32 mm de diâmetro e 17 µm de espessura de filme. CNPq, FAPESP, FINEP

FRACIONAMENTO DO EXTRATO ORGÂNICO POLAR PROVENIENTE DE AEROSSÓIS ATMOSFÉRICOS. CARACTERIZAÇÃO DO EXTRATO E DAS FRAÇÕES. L.A. Gundel, J.M. Daisey, K.R.R. Mahanama (Lawrence Berkeley Laboratory, Berkeley, U.S.A.) e L.R.F. Carvalho (Depto Química Fundamental, Instituto de Química, USP)

Um novo método de fracionamento (mg-scale) do extrato orgânico polar proveniente de aerossóis atmosféricos foi desenvolvido. A separação cromatográfica dos compostos polares foi feita baseando-se na cromatografia de coluna aberta usando colunas de extração com cianopropil como fase sólida. Foram obtidas doze frações distintas, com polaridades diferentes. A distribuição e recuperação de massa nas frações foram determinadas. Foi analisado comparativamente este método com outros anteriormente desenvolvidos. O fracionamento do extrato orgânico polar proveniente do material particulado padrão NBS 1649 também foi feito. As frações estão sendo caracterizadas através de várias técnicas: a) biotestes para determinação da atividade mutagênica; b) FTIR e testes analíticos colorimétricos "spot-tests" para identificação dos grupos funcionais ou classe de compostos; c) GC/MS, HPLC e cromatografia por exclusão de tamanho para identificação e quantificação dos compostos individuais. As análises dos espectros FTIR e os "spot-tests" serão reportados neste trabalho. A caracterização por IV indicou como o conteúdo dos grupos funcionais das diversas frações coletadas diferem um do outro. Os "spot-tests" revelaram a presença de aldeídos, cetonas, fenóis, ácidos carboxílicos, ésteres de nitratos, amidos e álcoois. Não foi detectado presença de aminas, ésteres de ácidos carboxílicos e nitro compostos, levando em conta os limites de detecção determinados para cada análise. Variações na composição química entre as diversas frações também foram evidenciadas pelos testes colorimétricos.

CNPq, LBL-USA
 BID-USP

QA-120

APLICAÇÃO DE TESTES COLORIMÉTRICOS ("SPOT TESTS") PARA A CARACTERIZAÇÃO DE CLASSES DE COMPOSTOS EM EXTRATOS ORGÂNICOS POLARES PROVENIENTES DE AEROSSÓIS ATMOSFÉRICOS. Silvia R. de Souza e Lilian R. F. de Carvalho. Instituto de Química. Departamento de Química Fundamental-USP

A fração orgânica polar encontrada no ar atmosférico apresenta uma mistura muito complexa com composição química ainda não estabelecida. A natureza não-volátil da fração orgânica polar tem sido a maior limitação para a caracterização desses materiais. O conhecimento dos diversos grupos funcionais se faz necessário para que em etapa posterior seja possível fazer derivatizações dos compostos presentes e assim identificação e quantificação dos compostos individuais, via GC/MS. Foram feitos testes colorimétricos para diversas classes de compostos no extrato original e em duas frações de polaridade diferentes. As análises revelaram evidências de ácidos carboxílicos, álcoois, compostos carbonílicos, sulfonas, fenóis e ésteres de nitratos, no extrato original e nenhuma evidência para anidridos de ácidos carboxílicos, peróxidos, ésteres de ácidos carboxílicos ou quinonas. A fração polar indicou a presença de ácidos carboxílicos, fenóis e álcoois e a fração muito polar, ácidos carboxílicos, compostos carbonílicos, álcoois e fenóis. Foram determinados os limites de detecção para cada teste analítico, empregando-se soluções padrões de diversas concentrações conhecidas. Os resultados obtidos através dos "spot tests" foram bastante compatíveis com os dados obtidos pelos espectros FTIR.

Apoio: CNPq e FAPESP