

**ÁREA DE CONCENTRAÇÃO EM GESTÃO E  
TECNOLOGIA AMBIENTAL  
LINHA DE PESQUISA EM TECNOLOGIAS DE  
TRATAMENTO DE ÁGUAS DE ABASTECIMENTO E  
RESIDUÁRIAS**

ISMAEL FERNANDO CHRISTMANN

DESENVOLVIMENTO DE EQUIPAMENTO DE  
ESPECTROFOTOMETRIA UV-VIS PARA A ANÁLISE DE  
ÁGUAS SUPERFICIAIS E SUBTERRÂNEAS BASEADO NA  
QUÍMICA ANALÍTICA BRANCA

*Ismael Fernando Christmann*

**DESENVOLVIMENTO DE EQUIPAMENTO DE ESPECTROFOTOMETRIA UV-VIS PARA A ANÁLISE DE ÁGUAS SUPERFICIAIS E SUBTERRÂNEAS BASEADO NA QUÍMICA ANALÍTICA BRANCA**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologia Ambiental – Doutorado, Universidade de Santa Cruz do Sul – UNISC, como requisito parcial para o título de Doutor em Tecnologia Ambiental.

Orientador: Prof. Dr. Adilson Ben da Costa

*Santa Cruz do Sul*

*2024*

*Este trabalho é dedicado à minha esposa Geraldine Schuh, companheira de todas as horas, que esteve ao meu lado durante esses 20 anos de caminhada acadêmica. Ela participou de momentos em que transpareciam minhas limitações, dificuldades e procrastinações, como também esteve presente nos momentos agradáveis, como as conclusões das etapas nesse contexto acadêmico, gratidão!*

## AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a minha família, que entendeu minha ausência em determinados períodos durante esta caminhada. A minha esposa na dedicatória e aos meus filhos, agradeço muito, é por vocês que acordo todos os dias para fazer o melhor.

Estendo o agradecimento aos meus parentes, amigos, colegas de trabalho e demais colegas, sejam de curso, de estudo, de treino, entre outros, que me apoiaram e sempre estiveram prontos para ajudar quando levantei a mão. Sabe-se que é um tempo que não volta, mas também, por outro lado foi um momento individual de aumento de percepção e aprofundamento de conhecimento, que tenho a certeza de que me fizeram uma pessoa melhor.

Agradeço, neste momento, a todos os professores, orientadores, reitores, mestres, doutores, especialistas, treinadores, técnicos, gestores, enfim, todos que passaram pelo meu caminho e ajudaram muito na construção do meu ser. Acredito que tudo poderia ter sido mais fácil seguindo apenas um campo de estudo, podendo ter um grande conhecimento específico em determinada área. Mas, não consigo ser assim, possuo um espírito aventureiro, e isso me levou a ser eclético na disciplinaridade, ou seja, me tornei um pouco mutante do conhecimento. bebi de diversas fontes, coloquei diversas lentes de conhecimento, observei por diferentes prismas, para aprender e enxergar de outras formas. O engraçado disso tudo é que, atualmente, no oceano da inovação que navego, isso vem fazendo muito sentido.

Além disso, abro um parêntese quando falo sobre professores: gostaria de fazer um breve agradecimento aos meus professores do ensino médio. Esse foi um período difícil em minha vida, tive muitas dificuldades. Tenho certeza de que, por muitas vezes, causei desapontamentos, por isso, tento, por meio deste trabalho, devolver um pouco da dedicação e comportamento que me faltaram naquela época. Diversas vezes me pego pensando que poderia ter feito muito mais e melhor, mas, naquele momento, não tinha estrutura para isso. Hoje, a estrutura necessária, e o sentimento de débito daquele período se somaram, e me deram forças para conquistar esta etapa. Então gostaria de agradecer e dizer que esta pesquisa é um pouco de vocês também.

Existem duas equipes que eu também gostaria de agradecer - um trabalho desse porte não é possível fazer com poucas mãos. Dessa forma, agradeço ao meu orientador o Prof. Dr. Adilson Ben da Costa, da Universidade de Santa Cruz do Sul - Unisc, por ter um grupo muito qualificado de pessoas que me ajudaram muito: Prof. Dr. Gilson Helfer, minha colega Jocelene Soares, o Maikel Kolling, a Roberta Rocha, a Luana Bender e tantos outros que me ajudaram.

Gostaria também de agradecer ao laboratório da Universidade Federal de Santa Maria - UFSM, por intermédio do qual o Prof. Dr. Valderi L. Dressler, também a Ana Viana, o Arthur Burg, a Taynara Riquiere, a Juliana Wille, entre outros, deram muito apoio e atenção a este trabalho.

Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq pela oportunidade de pesquisa e concessão da bolsa de estudos.

Por fim, e tão importante quanto, agradeço aos meus pais, que me concederam à vida, e a ela própria, que foi muito generosa comigo, dando-me a saúde que eu precisava para desenvolver este trabalho. Durante o doutorado, passamos ilesos por diversas dificuldades, por exemplo, a pandemia, e sua incerteza se tudo iria voltar a funcionar normalmente. E também agora, no final da pesquisa, as enchentes que assolaram o nosso Estado, o querido Rio Grande do Sul.

Por fim, acredito que tudo é construído com pequenas vitórias diárias. Essas vitórias não estão nos bons momentos, estão nos momentos difíceis, dentro de caixinhas que temos que abrir, entender, aprender, e transformar em energia para abrir outras sempre, é ali, dentro dessas caixas de momentos difíceis, que estão as pequenas vitórias diárias.

*Existem momentos na vida da gente, em que as palavras perdem o sentido ou parecem inúteis e, por mais que a gente pense numa forma de empregá-las, elas parecem não servir. Então a gente não diz, apenas sente. (adaptado de FREUD, S., 1900)*

## RESUMO

Diversas correntes ambientais para os laboratórios de análises químicas são propostas de tempos em tempos, como a química analítica verde (GAC do inglês, *Green Analytical Chemistry*) e a química analítica branca (WAC, do inglês *White Analytical Chemistry*). Elas visam reduzir a geração de resíduos, reduzir o uso dos reagentes tóxicos, otimizar o tempo operacional com análises locais e minimizar o consumo de energia. Estando alinhadas com o desenvolvimento sustentável (SD do inglês, *Sustainable Development*). Nesse contexto existem novas propostas ambientais que podem ser avaliadas. Nesta pesquisa, foi proposto, além de um alinhamento das correntes ambientais laboratoriais com a perspectiva da Governança Ambiental, Social e Corporativa (ESG, do inglês *Environmental, Social and Governance*), que é utilizada na concepção organizacional, o desenvolvimento de um espectrofotômetro ultravioleta-visível (UV-Vis do inglês *Ultraviolet-Visible Spectrophotometer*) de baixo custo, para análise de ferro, flúor, fosfato e matéria orgânica de águas superficiais e subterrâneas, que durante todo o seu desenho considerou os princípios das correntes ambientais laboratoriais. Como resultado, o equipamento apresentou, na análise de algumas espécies químicas, principalmente no espectro visível, valores satisfatórios em comparação ao equipamento de referência, como também ao que está reportado na literatura. Foram comparadas as curvas analíticas, o modelo de regressão, limite de detecção (LOD, do inglês *Limit of Detection*) e o limite de quantificação (LOQ do inglês *Limit of Quantification*) entre os equipamentos. Já no espectro ultravioleta, pelo foco da análise em campo, sem qualquer filtragem, o desempenho não foi satisfatório. Dos resultados encontrados destaca-se a determinação de ferro, o teste de recuperação no equipamento de referência apresentou o valor de 3,23 mg L<sup>-1</sup> e no equipamento desenvolvido foi 3,08 e mg L<sup>-1</sup>, e na determinação do fosfato o LOD e o LOQ do equipamento de referência o resultado obtido foi de 0,13 e 0,24 mg L<sup>-1</sup>, e no equipamento desenvolvido foi 0,10 e 0,25 mg L<sup>-1</sup> respectivamente. Por fim, o equipamento foi avaliado através da metodologia RGB 12 (Algoritmo baseado nos 12 princípios da WAC), que atualmente está mais alinhada com a perspectiva corporativa do ESG.

Palavras-chave: Espectrofotômetro, UV-Vis, WAC, ESG, Inovação, Sustentabilidade.

## **ABSTRACT**

### **DEVELOPMENT OF UV-VIS SPECTROPHOTOMETRIC EQUIPMENT FOR ANALYSIS OF SURFACE AND GROUNDWATERS BASED ON WHITE ANALYTICAL CHEMISTRY**

Various environmental approaches for chemical analysis laboratories are proposed from time to time, such as Green Analytical Chemistry (GAC) and White Analytical Chemistry (WAC). They aim to reduce waste generation, decrease reagent toxicity, optimize operational time through on-site analyses, and minimize energy consumption. These approaches are in accordance with Sustainable Development (SD); however, new environmental proposals can also be considered. Therefore, this research proposes not only to align laboratory environmental approaches with the Environmental, Social, and Governance (ESG) perspective, which is widely used in organizational frameworks, but also to explore additional possibilities. The development of a low-cost ultraviolet-visible spectrophotometer (UV-Vis) for the analysis of surface and groundwater samples, designed entirely with consideration of the principles of laboratory environmental approaches. As a result, the equipment demonstrated satisfactory results in the analysis of certain chemical species, particularly in the visible spectrum, when compared to the reference equipment and data reported in the literature. Analytical curves, regression models, the Limit of Detection (LOD), and the Limit of Quantification (LOQ) were compared between the devices. However, in the ultraviolet spectrum, due to the focus on testing samples directly in the field without any filtration, the performance was not satisfactory. From the results found, the determination of iron stands out. The recovery test on the reference equipment showed a value of 3.23 mg L<sup>-1</sup>, while on the developed equipment it was 3.08 mg L<sup>-1</sup>. For the determination of phosphate, the LOD and LOQ on the reference equipment were 0.13 and 0.24 mg L<sup>-1</sup>, respectively, and on the developed equipment, they were 0.10 and 0.25 mg L<sup>-1</sup>, respectively. Finally, the device was evaluated using the RGB 12 methodology (an algorithm based on the 12 WAC principles), which is currently more aligned with the corporate ESG perspective.

Keywords: Spectrophotometer, UV-Vis, WAC, ESG, RGB, Innovation, Sustainability.



## LISTA DE FIGURAS

### Tese

Figura 1 - Resumo das etapas de elaboração dos artigos na tese.....	31
Figura 2 – Vista do equipamento por partes.....	32
Figura 3 - Identidade visual.....	33

### Artigo 1

Figure 4 - Condensed Green Chemistry Principle .....	41
Figure 5 - Condensed Green Analytical Chemistry Principles .....	44
Figure 6 - Assessment of Factors Through the Alignment of WAC and ESG.....	52

### Artigo 2

Figura 7 - Resumo gráfico do trabalho.....	64
Figura 8 - Imagem das telas do software embarcado na memória do Specket.....	70
Figura 9 - Imagem do equipamento Specket com suas placas, leds, sensores e detectores.....	71
Figura 10 - Curva de calibração para determinação de ferro, utilizando o equipamento Specket, com LEDs vermelho (red), verde (green), azul (blue) e branco (white) e caminho óptico de 10 mm e 20 mm.....	74
Figura 11 - Curva analítica para determinação de fluoreto, utilizando o equipamento Specket, com LEDs vermelho (red), verde (green), azul (blue) e branco (white) e caminho óptico de 10 mm e 20 mm.....	78
Figura 12 - Curva analítica para determinação de fosfato, utilizando o equipamento Specket, com LEDs vermelho (red), verde (green), azul (blue) e branco (white) e caminho óptico de 10 mm e 20 mm.....	82
Figura 13 - Métrica RGB 12 para avaliação do equipamento Specket.....	88
Figura 14 - Métrica RGB 12 para avaliação dos equipamentos de referência.....	89

## LISTA DE TABELAS

### Tese

Tabela 1 - Os 12 princípios da Química Verde.....	21
Tabela 2 - Os 12 princípios da Química Analítica Verde.....	22
Tabela 3 - Os 12 princípios da Química Analítica Branca.....	24
Tabela 4 - Os 12 princípios da Engenharia Verde.....	25
Tabela 5 - Dez Princípios da Preparação de Amostra Verde.....	26

### Artigo 1

Table 6 - Search in the Scopus database .....	39
Table 7 - The 12 Principles of Green Chemistry .....	40
Table 8 - The 12 Green Analytical Chemistry Principles .....	43
Table 9 - The 12 White Analytical Chemistry Principles .....	46
Table 10 - The 12 Principles of Green Engineering .....	47
Table 11 - The 10 Green Sample Preparation Principles .....	49
Table 12 - Alignment of WAC with ESG principles .....	52
Table 13 - Alignment of the Three Frameworks: WAC, GC, and GAC with ESG Principles.....	54
Table 14 - Alignment of the Three Frameworks, WAC, GENG, and GSP with ESG Principles.....	58

### Artigo 2

Tabela 15 - Resultados dos modelos de regressão linear para determinação de ferro, utilizando a metodologia de referência e o equipamento Specket, com LEDs vermelho (red), verde (green), azul (blue) e branco (white) e caminho óptico de 10 mm e 20 mm.....	75
Tabela 16 - Limite de detecção e quantificação para determinação de ferro, utilizando a metodologia de referência e o equipamento Specket, com LED vermelho (red) e caminho óptico de 10 nm e 20 mm.....	75
Tabela 17 - Resultados da determinação de ferro, utilizando a metodologia de referência e o equipamento Specket, com LED vermelho (red) e caminho óptico de 10 mm e 20 mm respectivamente.....	77

Tabela 18 - Resultados dos modelos de regressão linear para determinação de fluoreto, utilizando a metodologia de referência e o equipamento Specket, com LEDs vermelho (red), verde (green), azul (blue) e branco (white) e caminho óptico de 10 mm e 20 mm.....	79
Tabela 19 - Limite de detecção e quantificação para determinação de fluoreto, utilizando a metodologia de referência e o equipamento Specket, com LED azul (blue) e caminho óptico de 10 mm e 20 mm.....	79
Tabela 20 - Resultados da determinação de fluoreto , utilizando a metodologia de referência e o equipamento Specket, com LED azul (blue) e caminho óptico de 10 mm e 20 mm respectivamente.....	81
Tabela 21 - Resultados dos modelos de regressão linear para determinação de fosfato, utilizando a metodologia de referência e o equipamento Specket, com LEDs vermelho (red), verde (green), azul (blue) e branco (white) e caminho óptico de 10 mm e 20 mm.....	83
Tabela 22 - Limite de detecção e quantificação para determinação de fosfato, utilizando a metodologia de referência e o equipamento Specket, com LED azul (blue) e caminho óptico de 10 mm e 20 mm.....	83
Tabela 23 - Resultados da determinação de fosfato , utilizando a metodologia de referência e o equipamento Specket, com LED azul (blue) e caminho óptico de 10 mm e 20 mm respectivamente.....	84
Tabela 24 - Resultados dos modelos de regressão para determinação de matéria orgânica, utilizando a metodologia de referência e o equipamento Specket, com LED ultravioleta e caminho óptico de 10 mm.....	85
Tabela 25 - Limite de detecção e quantificação para determinação de matéria orgânica, utilizando a metodologia de referência e o equipamento Specket, com LED ultravioleta e caminho óptico de 10 mm.....	86
Tabela 26 - Resultados das amostras observando o limite de quantificação em mg/L para determinação de MO, utilizando a metodologia de referência e o equipamento Specket, com LED UV e caminho óptico de 10 mm.....	87

## LISTA DE ABREVIATURAS

3D	Tridimensional
AGREE	Analytical Greenness Calculator
AI	Artificial Intelligence
APHA	American Public Health Association
B	Blue
CAPES	Fundação Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior
CNPq	Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico
Conama	Conselho Nacional do Meio Ambiente
CSS	Folhas de Estilo em Cascata
CV	Coefficiente de Variação
DBO	Demanda Bioquímica de Oxigênio
DQO	Demanda Química de Oxigênio
E	Environment
ESG	Governança ambiental, Social e Corporativa
EPA	Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos
FAPERGS	Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul
G	Green or Governance (identificados)
GAC	Química Analítica Verde
GC	Química Verde
GENG	Engenharia Verde
GSP	Preparação de Amostra Verde
HTML	Linguagem de Marcação de Hipertexto
IDE	Ambiente de Desenvolvimento Integrado
KHP	Potássio Hidrogênio Ftalato
LDR	Detector Resistor Dependente de Luz
LED	Diodo Emissor de Luz
LOD	Limite de Detecção
LOQ	Limite de Quantificação
mL	Mililitros
MO	Matéria Orgânica
PAH	Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos

PRI	Principles for Responsible Investment
R <sup>2</sup>	Coefficiente de Determinação
R	Red
RGB 12	Algoritmo baseado nos 12 princípios da WAC
RGB	Vermelho, Verde e Azul
RGBfast	Algoritmo com uma versão amigável do modelo RGB
S&P 500	Standard & Poor's
SD	Desenvolvimento Sustentável
SDGs	Objetivos do Desenvolvimento Sustentável
UN	Organização das Nações Unidas
USD	Dólar Americano
UV	Ultravioleta
UV-Vis	Ultravioleta-visível
WAC	Química Analítica Branca
Wi-Fi	Internet sem Fio
WHO	Organização Mundial da Saúde

## SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	14
2	OBJETIVOS.....	18
2.1	Objetivo Geral.....	18
2.2	Objetivos específicos.....	18
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	19
3.1	Correntes teóricas verdes.....	19
3.1.1	Química Verde.....	20
3.1.2	Química Analítica Verde.....	22
3.1.3	Química Analítica Branca.....	23
3.1.4	Outras correntes teóricas ambientais ligadas a laboratórios e análises.....	24
3.2	Desenvolvimento Sustentável e ESG.....	27
3.3	Espectroscopia.....	28
3.4	Determinação de matéria orgânica em águas de abastecimento e residuárias .	29
4	METODOLOGIA.....	31
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	34
5.1	Artigo 1.....	35
5.2	Artigo 2.....	64
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	95
7	TRABALHOS FUTUROS.....	97
8	ATIVIDADES REALIZADAS DURANTE O DOUTORADO.....	98
9	REFERÊNCIAS.....	101

## 1 INTRODUÇÃO

A preocupação ambiental e a preservação dos recursos hídricos por toda a sociedade mundial vêm crescendo significativamente. Conforme Mishra (2021), o acesso à água potável afeta mais de 1,1 bilhão de pessoas em todo o planeta. Além disso, a água é um recurso estratégico, pois possui um papel na manutenção e promoção do desenvolvimento socioeconômico como também é um fator de controle do meio ambiente (YANG, 2021). A água é um recurso natural essencial para sustentar a vida e o meio ambiente em nosso planeta. Tem-se a falsa impressão de que ela está disponível em abundância, sendo um presente gratuito da natureza. A água doce ocorre na forma de água superficial e subterrânea. A água subterrânea contribui com 99% do total da água doce da terra, é a fonte preferida de água potável, seja em áreas rurais ou urbanas, fornecendo 50% da água captada para uso doméstico e 25% da água para irrigação (UNESCO, 2022). No entanto, a composição química da superfície ou da subsuperfície é um dos principais fatores da necessidade de adequação da água para fins domésticos, industriais ou agrícolas (MEENAKSHI, 2006).

Tanto as águas superficiais quanto as águas subterrâneas possuem diversos componentes químicos inseridos em concentrações naturais. Alguns desses componentes são vitais para diferentes organismos e desempenham diversas funções. Mas o excesso de um componente químico pode acontecer de forma natural, como também pode ser adicionado por meio de despejo de resíduos e efluentes. Em ambas as formas, o excesso e o uso contínuo podem apresentar grandes riscos à saúde e até causar comprometimentos irreversíveis (KHATRIA, 2017), como, por exemplo, anormalidades hormonais, disfunção do sistema imunológico, diabetes mellitus, doenças cardíacas e hepáticas (KANG, 2001). Dessa forma, existe necessidade cada vez mais frequente de monitorar e controlar a contaminação dos recursos hídricos (MILANI, 2005).

Por outro lado, o controle e o monitoramento de recursos hídricos demandam controles e conforme Penatti e Guimarães (2011), os resíduos de análises químicas possuem composições complexas, sendo geralmente encontrados no estado líquido e classificados como resíduos perigosos de classe I, segundo a Norma Brasileira de Regulamentação - NBR 10004:2004. Portanto, os resíduos das atividades laboratoriais podem interferir direta ou indiretamente na qualidade ambiental dos ecossistemas, sendo considerados potencialmente prejudiciais ao meio natural.

Dessa forma, para colaborar com a diminuição da geração de resíduos das análises, otimizar o tempo operacional, entre outros aspectos, nesta pesquisa foi desenvolvido um espectrofotômetro portátil, que realiza a medição da quantidade de radiação (luz) que determinada substância absorve. Para isso, utilizou-se um diodo emissor de luz (LED do inglês *Light Emitting Diode*) dos modelos vermelho, verde e azul (RGB do inglês *Red, Green, Blue*), realizando medições no espectro visível, ou seja, no espectro eletromagnético que o olho humano pode enxergar, localizado na faixa de 400 nanômetros (nm) a 700 nm. Determinou-se os seguintes elementos: ferro, fluoreto e fosfato. Também foi instalado um LED ultravioleta (UV do inglês *Ultraviolet*), que emite o seu sinal na faixa entre 250 nm a 256 nm, para determinar a matéria orgânica (MO).

A escolha desses elementos ocorreu pelo fato de serem facilmente encontrados nas águas superficiais e subterrâneas. O ferro é um nutriente mineral vital, mas o consumo contínuo em nível elevado pode resultar em sobrecarga e danificar diferentes órgãos do corpo humano (KHATRIA, 2017). Esse dano pode acontecer por efeito da química de Fenton, que promove espécies reativas de oxigênio (ROS, do inglês *Reactive Oxygen Species*). O dano por ROS pode afetar órgãos que possuem alto metabolismo oxidativo como o fígado, o coração e o pâncreas, pois a química de Fenton, em uma de suas aplicações, promove justamente a oxidação de compostos orgânicos (Wessling-Resnick, 2017). O fluoreto, outro elemento químico encontrado nas águas, geralmente presente em menores concentrações e essencial para a formação do esmalte dentário e a mineralização dos ossos. No entanto, a ingestão em excesso pode causar fluorose, que produz manchas nos dentes e, em casos mais graves, podendo ocorrer danos estruturais na dentição (MEENAKSHI, 2006), como também, em concentrações extremas, a fluorose esquelética (COSTA, 2013). O fosfato, por sua vez, não é encontrado naturalmente em grandes concentrações em águas superficiais, mas as emissões descontroladas de efluentes afetam os sistemas hídricos, causando eutrofização e crescimento excessivo de algas (REN, 2022). A MO na água, segundo Zheng (2014), pode possuir hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (PAH do inglês *Polycyclic Aromatic Hydrocarbons*) em sua constituição. Por exemplo, a Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (EPA do inglês, *Environmental Protection Agency*) identificou 16 deles como poluentes prioritários, pois possuem propriedades mutagênicas, carcinogênicas e teratogênicas, e estão presentes no meio ambiente, no solo, na água, nos sedimentos e até no ar, por meio da poluição ou até mesmo naturalmente. Além disso, um elevado nível de concentração de MO impõe grandes



dificuldades no tratamento da água, em termos de processo adequado, otimização e controle operacional. Um aumento na carga de MO presente na água aumenta a demanda da purificação, fazendo que estações de tratamento invistam em métodos adicionais de remoção, gerando mais resíduos, elevando os custos operacionais e exigindo mais análises químicas (MATILAINEN, 2010).

A partir do desenvolvimento do espectrofotômetro, utilizando o espectro visível, realizou-se a determinação do ferro, fluoreto e fosfato e, de acordo com os métodos descritos no *Standard Methods of Wastewater* (APHA, 2017), possibilitou a otimização de tempo de operação, como a redução de custos e agilidade na tomada de decisão. Por meio do espectro ultravioleta, além dos benefícios citados anteriormente, colaborou-se também com a redução da geração de resíduos, alinhando-se com a perspectiva sustentável como a do ESG.

O estudo proposto tem potencial para auxiliar os laboratórios de análises químicas, pois os resíduos de laboratórios, principalmente em centros de pesquisas na área da química, com o advento do SD, revelaram-se uma grande preocupação. Existem vários estudos buscando alternativas para a diminuição da geração de resíduos tóxicos e perigosos, que não degradem o meio ambiente, permitindo a continuidade dos trabalhos de análises e pesquisas (NOLASCO, 2006). Mesmo assim, conforme Herrera-Melián *et al.* (2000), laboratórios de análises enfrentam grandes problemas com a geração de resíduos perigosos. Por vezes, mesmo gerando pequenas quantidades em cada projeto ou experimento, o montante de análises e amostras aumentam a cada dia, gerando um intenso fluxo que acarreta um grande custo na disposição final, pois muitos resíduos não podem ser misturados, tornando esse processo complexo e caro. Por isso, a disseminação dos princípios do SD acabou colaborando e introduzindo boas práticas dentro de laboratórios e plantas químicas, mas a geração e a toxicidade continuam gerando diversos problemas (KUROWSKA-SUSDORF, 2019).

Para colaborar com as boas práticas, em outro ponto deste trabalho, descreveu-se uma aproximação entre a WAC, que possui 12 princípios estabelecidos dentro de três eixos chamados de RGB, que tratam de princípios de desempenho analítico, princípios ambientais e princípios práticos e econômicos, com o ESG, que incentiva empresas a adotarem práticas sustentáveis em três áreas, ambiental, social e governança. Primeiramente, mesmo que o SD tenha adicionado boas práticas ambientais em diversas áreas, observou-se que existe uma contradição no que é proposto. Gibson (2001) afirma que os ganhos materiais não são medidas preservadoras do bem-estar humano. E, conforme a contribuição de Kuhlmann (2010), o

desenvolvimento econômico e social, estão ligados ao bem-estar presente, mas o cuidado ambiental pode estar ligado ao bem-estar futuro, e esse descompasso pode estabelecer um desequilíbrio em suas ações. Por isso, a adoção do ESG por muitas instituições revelou um importante direcionamento (AYDOGMUS, 2022), e a WAC, com o seu posicionamento semelhante ao ESG, em que o seu eixo verde sintetizou os princípios ambientais e sociais, e seus eixos azul e vermelho se alinham economicamente com os princípios de governança do ESG, leva a acreditar que essa aproximação faria sentido.

Portanto, tratou-se como problema desta pesquisa: o desenvolvimento de um equipamento UV-Vis para análise de águas superficiais e subterrâneas por meio da WAC pode contribuir para o ESG?

Dando continuidade a este trabalho, tem-se, na próxima subseção, a definição dos objetivos do trabalho. Seguindo essa estruturação, na sequência, abordar-se-á a fundamentação teórica, que irá fazer a contextualização das bases teóricas pesquisadas. Após, será apresentado um breve detalhamento da metodologia dos dois artigos que compõem essa tese. E dentro dos resultados e discussões, serão apresentados os dois artigos, sendo um de revisão e o outro, um artigo técnico, no qual este trabalho será aprofundado. Por fim, será realizado o fechamento, com as conclusões encontradas nesta pesquisa.

## **2 OBJETIVOS**

### **2.1 Objetivo Geral**

Desenvolver um espectrofotômetro portátil UV-Vis, de rápido processamento e sua metodologia, para determinação de ferro, fluoreto, fosfato e matéria orgânica presentes em águas superficiais e subterrâneas, utilizando os princípios da WAC.

### **2.2 Objetivos específicos**

- Propor um alinhamento entre os princípios da WAC com o ESG para verificar o potencial de aplicação dos princípios da WAC nesta perspectiva;
- Analisar a capacidade do LED RGB do espectrofotômetro portátil para determinar ferro, fluoreto e fosfato;
- Verificar se a determinação direta de matéria orgânica em águas superficiais e subterrâneas por meio da espectroscopia ultravioleta é viável;
- Realizar uma avaliação do desempenho do espectrofotômetro portátil, por meio da WAC, com o seu algoritmo de avaliação RGB 12.

### 3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

#### 3.1 Correntes teóricas verdes

Por vezes, precisa-se percorrer a sequência histórica do desenvolvimento de determinados procedimentos para entender onde se está e para onde se deve seguir. Por isso, a química, com suas reações, sempre será uma parte central do nosso desenvolvimento de uma forma geral, e não poderá deixar de ser estudada. Mas, além disso, existe o avanço tecnológico, que, em muitos casos, pode ser utilizado para diversas análises e procedimentos. É por meio desse contexto que será apresentada uma breve linha do tempo para se entender o desenvolvimento da química e da química analítica, e a necessidade global que com o avanço do cuidado ambiental a cada ano faz-se mais necessário.

As prevenções contra falsificações marcam o início da análise química, e têm sua origem na antiguidade, com a necessidade do controle da pureza do ouro e da prata. Mas o primeiro registro de um teste químico de análise qualitativa por via úmida foi realizado há quase 2000 anos por Caius Plinius Secundus, um naturalista romano que queria detectar sulfato de ferro em acetato de cobre. A partir dessa data, a química analítica nunca mais parou, e pode-se destacar alguns marcos históricos nessa caminhada. No século XVI e XVII, o pesquisador Robert Boyle estudou o uso das reações químicas para identificação de várias substâncias introduzindo novos reagentes analíticos, aplicando isso no exame de águas. No século XVIII, foram desenvolvidos métodos para a análise de minerais, como também novos elementos foram descobertos. Dessa forma, a análise qualitativa por via úmida foi muito usada. Teve-se, também, a obra de Fresenius, que selecionou elementos mais comuns e classificou-os em grupos analíticos com base na solubilidade de seus sulfetos, sendo um grande sucesso. E, por fim, destaca-se, na metade do século XIX, o uso da espectroscopia como ferramenta analítica (ANDRADE, 2009). Mas é somente no século XX que a preocupação ambiental começou a entrar em pauta, não só no universo da química, mas no mundo como um todo. Os primeiros passos foram em Estocolmo, 1972, na Conferência das Nações Unidas sobre o Meio Ambiente Humano, onde nasceu o conceito de Sustentabilidade e, em 1983, na Comissão Mundial sobre Meio Ambiente e Desenvolvimento da Organização das Nações Unidas, na qual foi desenhada a representação do desenvolvimento sustentável. Mas a disseminação desse novo posicionamento, incorporando essa postura foi por meio do Relatório Brundtland (WCED, 1987), que apresentou o desenvolvimento sustentável como um conceito de política. Na área da química, também

apareceram os primeiros alinhamentos com esse novo posicionamento. Em Paris em 1987, na VI Euroanálise, Malissa apresentou suas ideias sobre a necessidade de mudanças na química analítica em sua dissertação, incluindo o conceito de paradigma ecológico (MALISSA, 1987), que vinha ao encontro do relatório Pimentel (1985), que abordava o impacto da química na saúde da Terra. Dez anos depois, em 1995, o jornal *The Analyst, da Royal Society of Chemistry* do Reino Unido, propôs uma nova abordagem para a química analítica, que considerava os efeitos colaterais ambientais, denominando-a de Química Analítica Ambiental (ARMENTA, 2008).

Em 1998, foram introduzidos por Anastas e Warner os 12 princípios da GC, que deveriam ir para além do laboratório de pesquisa e, assim, atingir a indústria, a educação, o meio ambiente e o público em geral. Muitos termos foram usados para definir essa corrente, por exemplo: Química Ambientalmente Benigna, Química Limpa, Química Benigna por *design*, mas, mesmo com inúmeros termos, um novo movimento começou em busca de um conhecimento para chegar a um ideal (ANASTAS, 1999). A corrente GAC foi proposta por J. Namies'nik, entre 1999 e 2002 (Namies'nik, 2000), e seus 12 princípios foram formulados por Gaÿuszka, em 2013. O desafio proposto pela GAC é chegar a um compromisso entre a crescente qualidade dos resultados e a melhoria da compatibilidade ambiental, implementando os princípios do SD (GAÏUSZKA, 2013). A WAC veio alinhada com todos os princípios verdes, mas tentando olhar para as demandas sociais, a qualidade dos resultados, os pontos econômicos dos processos e a segurança ambiental (NOWAC, 2021).

### **3.1.1 Química Verde**

A Química Verde (GC, do inglês, *Green Chemistry*) foi proposta em 1998, com princípios de sustentabilidade para os laboratórios, e sua capacidade de inovação é utilizada para atender princípios ambientais e econômicos. Todas as substâncias ou atividades podem causar algum impacto, e a GC busca tornar a química o menos impactante possível ao meio ambiente, diminuindo os riscos aos seres humanos, impactando positivamente a comunidade química e a sociedade em geral, posicionando-se como uma importante ferramenta na prevenção da poluição (ANASTAS, 1999), elencados na Tabela 1, conforme Anastas (2010).

**Tabela 1. Os 12 princípios da Química Verde.**

Nº	Química Verde
1	Prevenção: evitar a produção do resíduo é melhor do que tratar ou limpar após sua geração;
2	Economia de átomos: desenhar metodologias sintéticas que possam maximizar a incorporação de todos os materiais de partida no produto final;
3	Síntese de produtos menos perigosos: quando possível, a síntese de um produto químico deve utilizar e gerar substâncias que possuam pouca ou nenhuma toxicidade à saúde humana e ao ambiente;
4	Desenho de produtos seguros: os produtos químicos devem ser desenhados para realizarem a função desejada sem toxicidade;
5	Solventes e Auxiliares mais Seguros: tentar não utilizar ou quando não for possível o uso de substâncias auxiliares (solventes, agentes de separação, secantes etc.), escolher substâncias inofensivas;
6	Busca pela eficiência de energia: minimizar a utilização de energia pelos processos químicos, com a possibilidade de conduzi-los pela temperatura e pressão do ambiente, diminuindo os impactos ambientais;
7	Uso de fontes renováveis de matéria-prima: Se houver possibilidade técnica ou econômica, utilizar matérias-primas renováveis, em detrimento às não renováveis;
8	Evitar a formação de derivados: minimizar a derivatização desnecessária (utilização de grupos de bloqueadores), porque essas etapas podem gerar resíduos pois requerem utilização de reagentes adicionais;
9	Catálise: utilização de reagentes catalíticos (tão seletivos quanto possível), pois são melhores que reagentes estequiométricos;
10	Desenho para a degradação: os produtos químicos precisam ser desenhados para que, no final de sua função, se fragmentem em substâncias inofensivas ao ambiente;
11	Análise em tempo real para a prevenção da poluição: desenvolvimento de metodologias analíticas que possam monitorar e controlar o processo em tempo real, antes da formação de substâncias nocivas;
12	Química intrinsecamente segura para a prevenção de acidentes: realizar a escolha da substância e o seu uso dentro dos processos químicos, voltadas a minimizar o potencial de acidentes químicos (vazamentos, explosões e incêndios);

Fonte: Anastas (2010).

Conforme Anastas (2010), a GC foi desenvolvida para ser aplicável a todas as áreas da química, podendo ser implementada em laboratórios, grandes empresas de produtos químicos, assim como em pequenos empreendimentos. Além disso, uma das áreas mais importantes e de grande crescimento da GC é dentro da química analítica. Por isso, para poder tratar de um universo tão amplo, a GC tem como aspecto de construção o conceito do *design*, o qual representa uma declaração de intenção humana, pois ele é realizado por meio de ideias, não podendo ser desenvolvido por acidente. Caracteriza-se pelo planejamento da síntese química e do *design* molecular para reduzir as consequências adversas e, desta forma, ajudar os químicos a atingirem o objetivo intencional de sustentabilidade.

### 3.1.2 Química Analítica Verde

O termo GAC foi proposto por J. Namies'nik (2000), quando se discutiam possibilidades de como deixar a química analítica mais verde (KOEL, 2006). O próprio Anastas (1999) comenta que, para evitar a poluição na fonte, era necessária a utilização de sensores em tempo real no processo, que podem detectar a formação de uma substância perigosa e interromper a sua produção, realizando a prevenção da poluição por meio da GAC. Armenta (2008) reforça que a utilização de métodos GAC nos prova ser uma estratégia inteligente para fornecer benefícios ambientais e econômicos. Aliado a isso, o crescimento e o desenvolvimento da quimiometria demonstram que os métodos espectroscópicos podem ser uma boa maneira de ampliar a atuação da GAC. O poder e a versatilidade dos sistemas analíticos modernos podem e devem minimizar o consumo de substâncias perigosas e a quantidade de resíduos gerados durante os ensaios. Já em 2013, Galuszka (2013) disseminou a GAC através da produção de 12 princípios, conforme Tabela 2.

**Tabela 2. Os 12 princípios da Química Analítica Verde.**

Nº	Química Analítica Verde
1	Técnicas analíticas diretas devem ser aplicadas para evitar o tratamento da amostra;
2	O tamanho mínimo da amostra e o número mínimo de amostras são metas;
3	Devem ser realizadas medições <i>in situ</i> ;
4	Integração de processos analíticos e economia de operações de energia reduzem o uso de reagentes;
5	Devem ser selecionados métodos automatizados e miniaturizados;
6	A derivatização deve ser evitada;
7	A geração de um grande volume de resíduos analíticos deve ser evitada e a gestão adequada de resíduos analíticos deve ser fornecida;
8	Métodos multi-analitos ou multi-parâmetros são preferidos em relação a métodos que usam um analito de cada vez;
9	O uso de energia deve ser minimizado;
10	Reagentes obtidos de fontes renováveis devem ser preferidos;
11	Os reagentes tóxicos devem ser eliminados ou substituídos;
12	A segurança do operador deve ser aumentada.

Fonte: Galuszka (2013).

Por meio desses princípios, o SD deve estar muito alinhado com todo esse processo, pois um dos seus objetivos é reduzir o uso de recursos não renováveis a favor das energias renováveis. Essa conceituação deve estimular o desenvolvimento de métodos analíticos que utilizam reagentes naturais (GALUSZKA, 2013).

### 3.1.3 Química Analítica Branca

A WAC, desenvolvida em 2021, não é um conceito novo em si, mas, sim, uma nova abordagem sobre as ideias da GAC, para ampliar seu campo e a relação com a química analítica. Por isso, para a química analítica ser mais sustentável, ela deve olhar também para os aspectos sociais de uma forma mais ampla. Dessa forma, a GAC equivale a uma química analítica sustentável, pois não apresenta fatores de equidade social (MARCINKOWSKA, 2019).

Percebe-se, aqui, a existência de uma lacuna, já que as correntes anteriores à WAC não usavam o olhar social em seus princípios, afirma Marcinkowska (2019). A química analítica procura apenas considerar o custo econômico em suas atividades, principalmente pela viabilidade comercial. Portanto, quando se analisa a questão sob a ótica do SD, a tomada de decisão utiliza o prisma das três dimensões: a econômica, a social e a ambiental. Tanto a GC quanto a GAC têm como principal objetivo apenas o aspecto ambiental. Mesmo a GAC introduzindo algumas considerações sobre a segurança do operador, e atendendo parcialmente a alguns critérios de responsabilidade ambiental, ela não apresenta uma equidade nos processos analíticos, sociais e ambientais, se for analisada sob a ótica dos três pilares das dimensões do SD.

Assim, segundo Nowac (2021), a implementação dos princípios da GAC possui uma questão relacionada ao equilíbrio e ao entendimento do verde do método. Por isso, a utilidade do método é condicionada pela eficiência analítica e considerações práticas e econômicas e, desta forma, existem muitas visões de como equilibrar o verde do método. Mas isso está ligado e depende das condições econômicas, sociais e geográficas locais de onde está sendo realizada a aplicação.

Por isso, a WAC também formulou 12 princípios de uma forma diferente, tentando trazer o equilíbrio do SD em sua formulação. Eles foram divididos em três eixos, com quatro princípios dentro de cada um. Um eixo identificado com vermelho, que é relativo à eficiência analítica; um eixo azul, que se refere à eficiência prática e econômica; e um eixo verde, no qual foram sintetizados os 12 princípios da GAC e significa conformidade com os seus princípios, que podem ser visualizados na Tabela 3, conforme Nowac (2021).



**Tabela 3. Os 12 princípios da Química Analítica Branca.**

Cor	Química Analítica Branca
Vermelho (Red) O vermelho é atribuído à eficiência analítica, conforme expresso pela validação e critérios (exatidão, precisão, LOD e outros)	<p>R1. Âmbito de aplicação: os métodos analíticos devem ter a mais ampla gama de aplicabilidade possível, expressa no número de analitos determinados simultaneamente, faixa de linearidade das determinações, compatibilidade com vários tipos de amostras e resistência à presença de potenciais interferências;</p> <p>R2. LOD e LOQ: os métodos analíticos devem ter os menores limites possíveis de detecção e quantificação;</p> <p>R3. Precisão: os métodos analíticos devem ser caracterizados pela melhor precisão possível, expressa em repetibilidade e reprodutibilidade dos resultados;</p> <p>R4. Exatidão: os métodos analíticos devem ser tão exatos quanto possível (erro relativo mínimo de determinações e recuperação o mais próximo de 100% possível);</p>
Verde (Green) O verde significa a conformidade com os princípios do GAC	<p>G1. Toxicidade de reagentes: os métodos analíticos devem ser caracterizados pela menor toxicidade possível dos reagentes usados e pela máxima parcela de reagentes biodegradáveis/renováveis e materiais;</p> <p>G2. Número e quantidade de reagentes e resíduos: os métodos analíticos devem ser caracterizados pelo menor consumo de reagentes e produção de resíduos (independentemente de sua toxicidade);</p> <p>G3. Energia e outras mídias: os métodos analíticos devem ser caracterizados pelo menor consumo possível de eletricidade e outros utilitários. Métodos no local, automatizados e de alto rendimento, são preferidos para economizar energia;</p> <p>G4. Impactos diretos: o uso de métodos analíticos não deve afetar diretamente humanos, animais e a naturalidade genética. A exposição de humanos (pessoal) a fatores prejudiciais e o uso de animais e/ou modificações genéticas devem ser evitados;</p>
Azul (Blue) O azul representa a produtividade e eficiência prática / econômica	<p>B1. Eficiência de custo: os métodos analíticos devem ser tão eficientes em termos de custo quanto possível (em que o custo total da análise deve levar em consideração instrumentos, materiais, mídia e pessoal);</p> <p>B2. Eficiência de tempo: os métodos analíticos devem ser caracterizados pela maior eficiência de tempo possível (o menor tempo total de análise, incluindo o desenvolvimento do método e todas as fases do fluxo de trabalho analítico);</p> <p>B3. Requisitos: os métodos analíticos devem ser caracterizados por requisitos práticos mínimos, incluindo a quantidade de amostras usadas, acesso a equipamentos avançados, qualificações de pessoal e infraestrutura laboratorial;</p> <p>B4. Simplicidade operacional: os métodos analíticos devem ser caracterizados pelo mais alto nível possível de miniaturização, integração, automação (métodos on-line, tecnologias de IA) e portabilidade (medições no local).</p>

Fonte: Nowac (2021).

Dessa forma, o que a WAC busca é o equilíbrio entre as cores, encaixando-se melhor com o modelo de SD. Sendo assim, para entender o nome “branco” que intitula essa corrente, isso acontece quando as três cores iluminam juntas. Assim, o método torna-se branco, ou seja, quando atende a critérios variados, mantendo a completude simbolizada pela cor branca (NOWAC, 2021).

### 3.1.4 Outras correntes teóricas ambientais ligadas a laboratórios e análises

A engenharia verde (GENG, do inglês, *Green Engineering*) teve seu início em 2003. Ela foi desenvolvida por Anastas, o mesmo pesquisador que criou a GC. Ela busca, por meio

da ciência e tecnologia, alcançar a sustentabilidade. Por isso, os 12 princípios da GENG foram criados para fornecer uma estrutura para cientistas e engenheiros perceberem a necessidade de que a saúde humana e o meio ambiente devem ser levados em consideração ao projetarem novos materiais, produtos, processos e sistemas. E que os fatores ambientais, econômicos e sociais devem ser observados pelo *design*, para além das especificações básicas de qualidade e saúde. Para isso, os projetistas devem considerar todo o ciclo de vida, incluindo a energia e os materiais, como também é necessário considerar todos os impactos, desde a aquisição, fabricação, distribuição, uso e descarte final (ANASTAS, 2003). Ou seja, para maximizar a sustentabilidade, foi criada uma estrutura que avalia os elementos do *design* que são demonstrados, na Tabela 4 conforme Anastas (2003).

**Tabela 4. Os 12 princípios da Engenharia Verde.**

Engenharia Verde	
1	Os projetistas precisam se esforçar para garantir que todos os materiais e as entradas e saídas de energia sejam tão inerentemente não perigosas quanto possível;
2	É melhor prevenir o desperdício do que tratar ou limpar resíduos depois de formados;
3	As operações de separação e purificação devem ser projetadas para minimizar o consumo de energia e materiais;
4	Produtos, processos e sistemas devem ser projetados para maximizar a eficiência de massa, energia, espaço e tempo;
5	Produtos, processos e sistemas devem ser “produto puxado” em vez de “entrada empurrada” por meio do uso de energia e materiais;
6	A entropia e a complexidade incorporadas devem ser vistas como investimento ao fazer escolhas de <i>design</i> em reciclagem, reutilização ou disposição benéfica;
7	A durabilidade desejada, e não a imortalidade, deve ser uma meta de projeto;
8	Projetar para capacidades ou capacidades desnecessárias (por exemplo, “um tamanho serve para todos”) deve ser considerado uma imperfeição de projeto;
9	A diversidade de materiais em produtos multicomponentes deve ser minimizada para promover a desmontagem e retenção de valor;
10	O <i>design</i> de produtos, processos e sistemas deve incluir integração e interconectividade com os fluxos de energia e materiais disponíveis;
11	Produtos, processos e sistemas devem ser projetados para atuação em uma “vida após a morte” comercial;
12	Os insumos materiais e energéticos devem ser renováveis e não esgotáveis.

Fonte: Anastas (2003)

A Preparação de Amostra Verde (GSP, *Green Sample Preparation*) é a mais nova corrente teórica nesse segmento. Foi publicada em 2022, e seu principal objetivo é estabelecer um roteiro para desenvolver metodologias analíticas mais verdes. Não é uma nova subdisciplina da preparação, mas sim, um princípio orientador para avaliar o verde dos procedimentos de preparação. A GAC tem como objetivo redefinir e reavaliar os métodos analíticos, abordando

a segurança de solventes/reagentes, geração de resíduos tóxicos de laboratórios, segurança e eficiência energética. A abordagem GSP fornece um procedimento para melhorar o desempenho dos métodos de preparação de amostras e até das metodologias analíticas. A grande diferença entre os conceitos da GAC e do GSP é que a GAC é focada na etapa de medição, descuidando da etapa de preparação da amostra, que é o foco do GSP (LÓPEZ-LORENTE, 2022). Segundo o mesmo autor, dentro do primeiro princípio da GAC, que relata que “técnicas analíticas diretas devem ser aplicadas para evitar tratamento da amostra”, existe uma discussão que aborda a exclusão da etapa de preparação, pois sugere que se evite o tratamento. Dessa forma, para lidar com essa lacuna, foram definidos e formulados os dez princípios do GSP para proteger o meio ambiente.

De fato, conforme López-Lorente (2022), o primeiro princípio da GAC apenas cria uma falsa impressão da omissão da etapa de preparação da amostra. Na verdade, é um processo de interpretação, pois, na época da formulação da GAC, não existia um desempenho tão forte das tecnologias de preparação das amostras disponíveis. Essa suposição não foi bem refletida e levou à formulação da GSP, mas, por outro lado, também ocorreram muitos avanços tecnológicos na etapa de preparação, o que vem ao encontro do primeiro princípio da GAC. Os dez princípios da GSP foram definidos, conforme a Tabela 5, de acordo com López-Lorente (2022).

**Tabela 5. Dez Princípios da Preparação de Amostra Verde.**

Preparação de Amostra Verde	
1	Favorecer o preparo de amostras <i>in situ</i> .
2	Usar solventes e reagentes mais seguros.
3	Visar materiais sustentáveis, reutilizáveis e renováveis.
4	Minimizar o desperdício.
5	Minimizar amostras, produtos químicos e quantidade de materiais.
6	Maximizar o rendimento das amostras.
7	Integrar as etapas e promover a automação.
8	Minimizar o consumo de energia.
9	Escolher a configuração pós-preparação da amostra mais ecológica possível para análise.
10	Garantir procedimentos seguros para o operador.

Fonte: López-Lorente (2022)

Considerando os dez princípios na preparação da amostra como uma etapa do procedimento químico analítico geral, López-Lorente (2022) afirma que ele conecta as etapas de amostragem e medição. Outro ponto é que o GSP introduz o princípio de processamento de

amostras, no qual faz a relação entre o tempo e a velocidade com que as amostras são processadas. Por fim, o GSP manifesta a conformidade com o SD, contribuindo direta ou indiretamente com diversos Objetivos do Desenvolvimento Sustentável (SDGs, do inglês *Sustainable Development Goals*) da Organização das Nações Unidas (NU, do inglês *United Nations*).

### 3.2 Desenvolvimento Sustentável e ESG

A GC foi concebida de acordo com as regras do *design* e está ligada ao planejamento, principalmente de produtos e processos, incentivando a fabricação de produtos menos perigosos, assim como os seus efeitos sobre a natureza e os seres humanos (ANASTAS, 1999). Conforme o mesmo autor, sua criação teve um grande impacto, atingiu a indústria e o meio ambiente e, desta forma, foi levada também para os laboratórios e para a educação. A GAC foi criada porque nem todos os princípios da GC se aplicavam, principalmente quando voltados a procedimentos ou metodologias analíticas (GALUSZKA, 2013). Já a WAC foi inspirada no modelo RGB para buscar uma perspectiva para a implementação dos princípios do SD (NOWAC, 2021). Por isso, se observa que, no cerne de todas as três correntes, existe essa perspectiva de alinhamento com o SD.

De fato, elas foram desenvolvidas por meio de um alinhamento com o SD e, nesse contexto, seus principais conceitos descrevem que a interpretação do SD deve ser realizada com base em três dimensões - a social, a econômica e a ambiental - e que elas devem funcionar harmonicamente (KUHLMANN, 2010). Essas três dimensões estão presentes dentro do conceito *Triple Bottom Line*, que foi criado, principalmente, para operacionalizar a responsabilidade social corporativa, vindo da Administração, onde foi desenvolvido o formato de equilíbrio da sustentabilidade em três dimensões (ELKINGTON, 1994). Essa mesma visão em três dimensões está incorporada e definida na Agenda para o Desenvolvimento das Nações Unidas de 1997:

“O desenvolvimento é um empreendimento multidimensional para alcançar uma maior qualidade de vida para todas as pessoas. O desenvolvimento econômico, o desenvolvimento social e a proteção do ambiente são interdependentes e reforçam mutuamente os componentes do desenvolvimento sustentável.” (*Agenda for Development. New York: United Nations, 1997*).

Mas, de alguma forma conceitual, esse equilíbrio proposto pelo SD acaba apresentando contradições. Existe uma distinção entre o desenvolvimento econômico e o desenvolvimento social, em relação à proteção ambiental, porque ganhos materiais não são medidas preservadoras do bem-estar humano (GIBSON, 2001). Dessa forma, segundo Kuhlmann (2010), o que temos que levar em consideração é a harmonia entre as dimensões e não o peso que se vai colocar sobre cada uma, porque os aspectos de desenvolvimento econômico e de desenvolvimento social são sobre o bem-estar presente. Já a proteção do ambiente trata do cuidado com o futuro, o que pode tornar as duas primeiras mais importantes do que a terceira, e, assim sendo, o desenvolvimento não pode ocorrer às custas das gerações futuras, violando uma exigência do relatório Brundtland.

Já o ESG vem aumentando sua popularidade, principalmente entre as empresas de capital aberto, que demonstram credibilidade através desta perspectiva e acabam, assim, respondendo às demandas dos investidores. Além disso, algumas utilizam como uma forma de obter vantagem competitiva, indicando que essas empresas podem estar recebendo alguma recompensa econômica com esse movimento (AYDOGMUS, 2022). Em virtude disso, Litvinenko (2022) também corrobora que o posicionamento do ESG perante a economia global é como uma ferramenta de descarbonização, geralmente utilizando indicadores numéricos, que são um fator que sustenta a capacidade das empresas em abordar as questões ambientais e sociais, para, assim, tomar decisões gerenciais melhorando a sustentabilidade dos seus negócios.

### **3.3 Espectroscopia**

A determinação colorimétrica de um componente é, geralmente, realizada com base na Lei de Lambert-Beer, frequentemente referida como Lei de Beer. Essa lei estabelece que para um determinado comprimento de onda, existe uma relação linear entre a absorvância e a concentração do composto de interesse, desde que o comprimento do caminho óptico permaneça constante. Mas ela se aplica apenas a determinadas faixas de concentrações de um analito. Em concentrações altas acima 0,01 mol (M), a precisão da lei diminui e desvios podem ocorrer, fatores corretivos, como a variação do índice de refração causada pela concentração do analito, precisam ser considerados (CERDA, 2022).

Dessa forma, para determinar o desempenho de uma nova tecnologia, Pasquini (2003) afirma que ela deve estar amparada fortemente na existência de um método de referência

robusto, com resultados aceitáveis. Assim, seus resultados podem ser correlacionados com o método de referência estabelecido. O desempenho do método e da tecnologia vai depender muito da associação dos valores de referência e das amostras no conjunto na fase de implantação.

Segundo Cizek *et al.* (2019), a espectroscopia UV tem sido usada para medir poluentes em águas residuais e pluviais. Suas sondas espectrofotométricas registram a absorção da radiação eletromagnética em diferentes comprimentos de onda, convertendo os dados em coeficientes de absorção específicos. Até pouco tempo, a espectroscopia era utilizada para medir poucos elementos, mas sua covariância com outras propriedades resultava em correlações de leituras com várias espécies químicas. Conforme Lyndgaard *et al.* (2014), a espectroscopia UV é sensível à faixa de  $\text{mg L}^{-1}$  (ppm) para muitos compostos e, além disso, é capaz de medir *on-line* com velocidade inferior a um segundo. Por isso, Wang (2019) contribui afirmando que a utilização da espectroscopia é um método puramente físico de detecção, contínuo e que monitora em tempo real as análises. O desenvolvimento de sensores UV-Vis para monitoramento é uma tecnologia emergente. Pode ser usada para medições em tempo real, em campo e de modo *off-line* no laboratório para determinação da absorbância. Dessa forma os sensores UV-Vis podem ser aplicados para detectar mudanças rápidas e usados para abordagens adaptativas em eventos de fluxo (ZHU, 2021).

Conforme Cerda (2022), para medições precisas, são necessários diversos testes de validação. Geralmente cria-se uma curva de calibração é feita com vários padrões, um efeito indesejado comum das amostras é a dispersão de luz causada por partículas suspensas ou coloidais. Essa dispersão permanece quase constante na faixa espectral UV e visível em geral. Portanto, há uma sobreposição com o espectro do analito a ser determinado, no qual deve ser implantada alguma técnica para a retirada da interferência, como troca da zona espectral, ou a espectroscopia derivada e, por fim, a técnica de deconvolução.

### **3.4 Determinação de matéria orgânica em águas de abastecimento e residuárias**

Conforme Wiczerzak (2016), o desenvolvimento da economia, sociedade e civilização está profundamente ligado ao acesso a água de boa qualidade. Os poluentes e micropoluentes representam grandes desafios às técnicas de tratamento de águas residuárias, a quantidade de poluentes na água vem aumentando constantemente. Um dos principais parâmetros para determinação do grau de poluição orgânica nas águas é a demanda química de oxigênio (DQO).

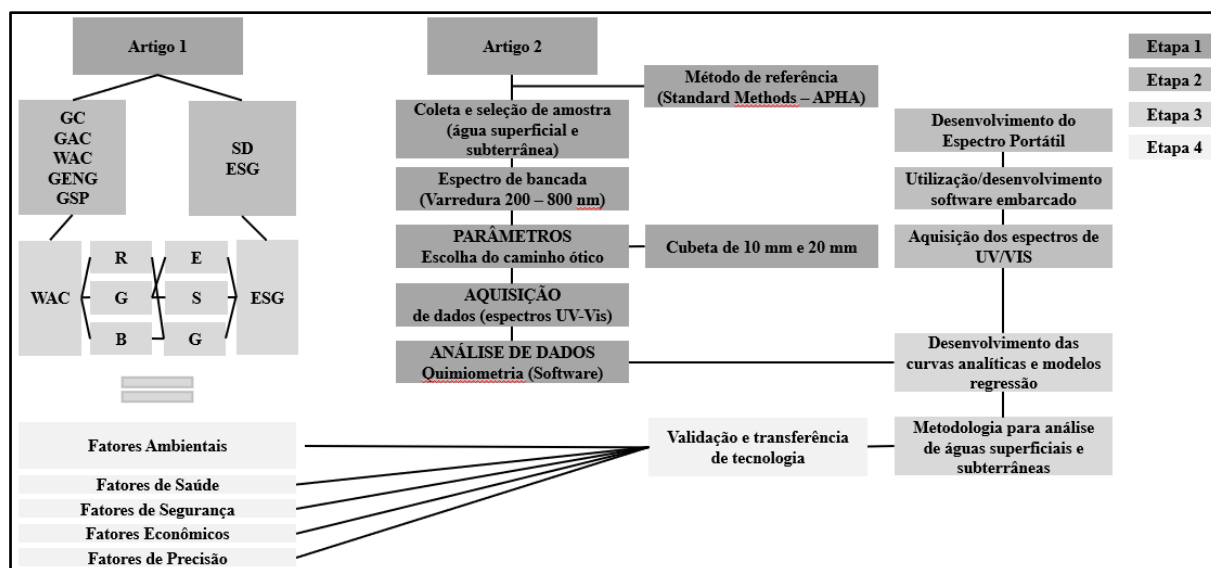
Segundo Bendicho *et al.* (2012), esse parâmetro refere-se à quantidade de equivalentes de oxigênio por oxidantes químicos. As problemáticas dessas análises envolvem longos tratamentos com cromo hexavalente [Cr(VI)], em presença de ácido forte, como o ácido sulfúrico (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>), e catalisadores tóxicos como óxido de mercúrio [Hg(II)] e iodeto de prata [Ag (I)].

Para Wang *et al.* (2019), a DQO é um dos principais indicadores do monitoramento ambiental da poluição orgânica. Atualmente, as formas para medir a DQO e determinar a qualidade da água são baseadas em métodos químicos que requerem aquecimento, digestão, titulação, entre outras etapas. A utilização de reagentes químicos pode causar demora na análise, baixa estabilidade, poluição e um manejo complicado. Por isso é que existe uma grande necessidade de determinar a poluição nas águas superficiais, principalmente ao nível da indústria. Para isso, é necessário se embasar em um método simples, confiável e rápido, pois os atuais procedimentos utilizam produtos químicos perigosos, como o mercúrio, para suprimir interferências de cloreto (GEERDINK, *et al.*, 2017).

Por um lado, observa-se que as correntes ambientais para os laboratórios desenvolveram, com o passar dos anos, novas metodologias, principalmente, fazendo o trabalho de conciliar a anterior, absorvendo, além de princípios ambientais, princípios de saúde, de segurança, princípios analíticos, práticos e econômicos. De uma forma parecida, a preocupação ambiental mundial também desenvolveu novos conceitos, partindo do conceito de sustentabilidade até chegar nas práticas do ESG. Uma aproximação da WAC com o ESG, aliado ao desenvolvimento de tecnologias que podem operar de uma forma *online*, ou fora dos laboratórios, otimizando tempo de trabalho, tendo rápido processamento, reduzindo perigos e riscos, tanto de segurança como ambientais, minimizando o consumo de energia, além de operar gerando menos resíduos, principalmente tóxicos, faz muito sentido para os desafios socioeconômicos e ambientais que estão nos esperando. Dessa forma a partir desse ponto, é essa aproximação e desenvolvimento que esta pesquisa irá apresentar.

## 4 METODOLOGIA

A metodologia detalhada da pesquisa realizada é apresentada nos dois artigos que compõem esta tese. Brevemente, no fluxograma se pode observar a construção dos artigos, conforme a Figura 1:



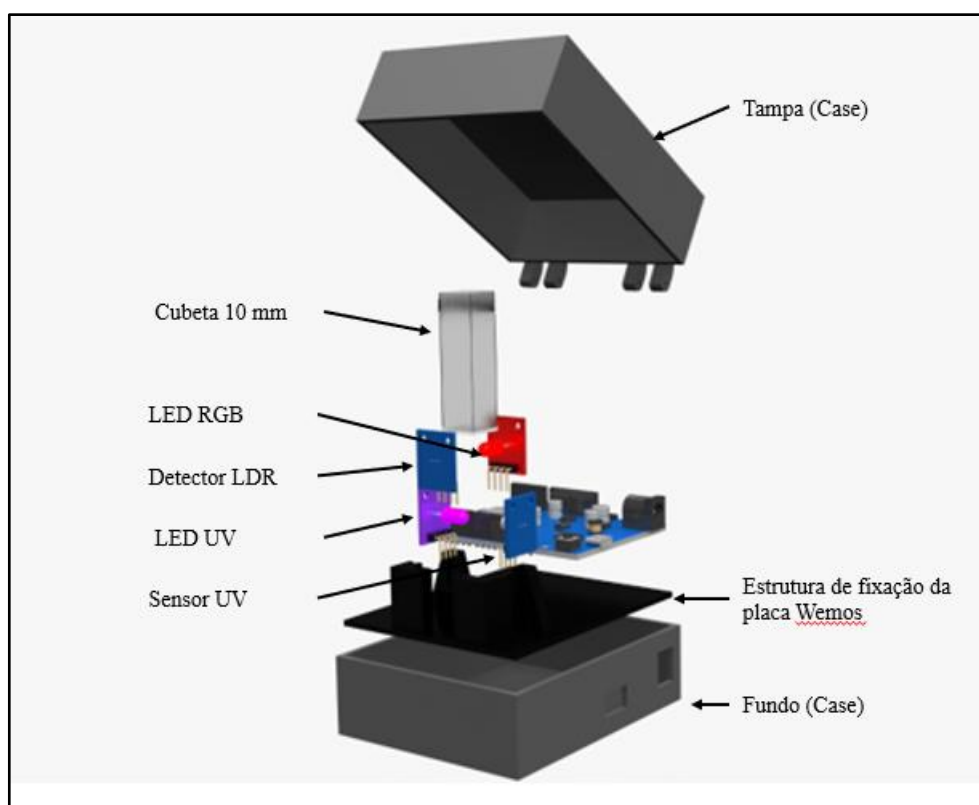
**Figura 1 - Resumo das etapas de elaboração dos artigos na tese.**

Para o **artigo 1**, foi realizada uma pesquisa no banco de dados Scopus, onde foram filtrados todos os artigos que continham o nome da corrente teórica ambiental para os laboratórios em seu título, configurando a busca a partir da sua criação até Junho de 2024. A partir dessa pesquisa, os artigos mais relevantes foram utilizados para desenvolver o artigo de revisão, que tem como objetivo analisar as correntes teóricas através da perspectiva do ESG, substituir a conexão anteriormente feita com o SD e identificar as diferenças entre as correntes teóricas ambientais na química e seus princípios.

Já o **artigo 2** se divide em duas etapas: a primeira, refere-se à construção e otimização do equipamento, e a segunda, à metodologia analítica utilizada para a aquisição dos espectros. O equipamento possui um case impresso em impressora 3D (Tridimensional do inglês, *three-dimensional*), uma placa protótipo Wemos D1 R33, que fornece um Chip ESP 32, e seu ambiente de desenvolvimento integrado (IDE do inglês, *Integrated Development Environment*) está na plataforma de prototipagem (Arduino®). O *software* foi desenvolvido em linguagem de programação (C++) na base de dados (*back-end*). Na interface gráfica (*front-end*), utilizou-se



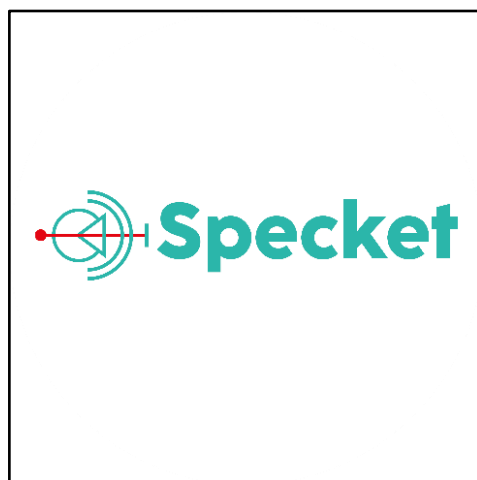
como interface *javascript*, linguagem de marcação de hipertexto (HTML do inglês, *Hyper Text Markup Language*) e folhas de estilo em cascata (CSS do inglês, *Cascading Style Sheets*). Esse dispositivo foi equipado com dois conjuntos de detectores e emissores de radiação LED. Um conjunto é aplicado à análise na região do espectro visível e outro na região do espectro ultravioleta. O conjunto do espectro visível usa um detector resistor dependente de luz (LDR do inglês, *Light Dependent Resistor*) e um LED RGB, enquanto o conjunto do espectro ultravioleta usa um sensor ultravioleta UVM-30 e LED UV na faixa espectral de 250 nm a 256 nm, como pode ser observado na Figura 2.



**Figura 2 - Vista do equipamento por partes.**

Na parte de reagentes e métodos, foram feitas soluções de ferro, fluoreto e fosfato para analisar o desempenho do LED RGB e de bitalato para avaliar o LED UV. Todas as metodologias foram realizadas seguindo APHA (2017). Por fim, o custo de aquisição dos componentes do equipamento ficou em torno de 60,00 USD (USD, do inglês *United States Dollar*), e o esforço de montagem e programação, em torno de 70 horas. Além disso, também

foi desenvolvida uma identidade visual, que dá o nome para o equipamento, batizado de Specket (Fig. 3).



**Figura 3 - Identidade visual do equipamento.**

O nome escolhido foi uma combinação da palavra em inglês *spectrophotometer* com a palavra *pocket*, formando o nome de Specket. Avaliou-se que essa seria uma forma fácil de conseguir referenciar o equipamento no seu dia a dia, como também citá-lo na pesquisa. Na próxima subseção, dentro do artigo 2, o equipamento será apresentado com mais clareza.

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados desta pesquisa se encontram em dois artigos produzidos. O primeiro é um artigo de revisão, **artigo 1**. Neste artigo estão apresentadas correntes teóricas dos laboratórios, verificando a ligação delas com o desenvolvimento sustentável. Dentro dessa perspectiva, observou-se que o desenvolvimento sustentável possui algumas contradições e percebeu-se uma grande aspiração da corrente WAC de se alinhar com a perspectiva do ESG. Dessa forma, para observar se ela possui a maior vocação, decidiu-se, por meio desse alinhamento, analisar todas as correntes, entre elas a GC, a GAC, a GENG e a GSP. O artigo 1 foi submetido para uma revista científica, por isso se encontra em inglês e na formatação do seu *template*.

O **artigo 2** trata da aplicação dos objetivos propostos neste projeto, chamado também de artigo técnico da pesquisa. Ele traz o desenvolvimento de um espectrofotômetro portátil que, através de seus LEDs, pode realizar medições no espectro visível e em determinada faixa do espectro ultravioleta. O equipamento possui a construção da parte eletrônica, assim como o desenvolvimento do *software* que já se encontra embarcado nele, sendo acessado via internet sem fio (Wi-Fi, do inglês *Wireless Fidelity*) por qualquer *software* navegador de internet. Após a montagem, foram realizados testes de verificação e análises de amostras, tanto no espectro visível quanto no ultravioleta. Toda a tecnologia apresentada pode ser replicada para diminuir custos de análises e reduzir a quantidade de resíduos, alinhando-se com os princípios da WAC.

## 6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O foco principal desta tese foi desenvolver um espectrofotômetro portátil UV-Vis, de rápido processamento e sua metodologia, para determinação de ferro, fluoreto, fosfato e MO presentes em águas superficiais e subterrâneas, utilizando os princípios da WAC.

Assim, foi desenvolvido todo o equipamento, seu conjunto eletrônico e seu *software* de gerenciamento de processamento rápido, por meio do qual é possível realizar a operação para a realização das análises. Podendo ser realizadas as curvas analíticas, assim como verificar previamente, de forma gráfica, o modelo de regressão do elemento analisado. Os princípios da WAC foram levados em consideração, com o objetivo de atingir diversas mudanças na estrutura do protótipo e alcançar os critérios analíticos, os fatores práticos como portabilidade e aplicabilidade, os princípios sustentáveis, como redução do desperdício, economia de energia, segurança, e por fim sua orientação econômica como o custo.

Também foi foco dessa pesquisa, o alinhamento entre os princípios da WAC e do ESG, apresentou-se como uma teoria adequada, pois na perspectiva do ESG, os princípios da WAC devem avançar para mais laboratórios, principalmente pela busca do equilíbrio entre o ambiental, social e econômico, aliado a parâmetros para tomada de decisão, necessária nesse momento atual dentro das organizações. Por isso quando se pensa nessa possibilidade, não está apenas olhando para laboratórios de química analítica, mas sim para todos os tipos de laboratórios que precisam conciliar fatores, ambientais, de saúde e segurança, econômicos e de precisão, observando novas tecnologias, como a desenvolvida nesta pesquisa.

Pelo desempenho do LED RGB, obtiveram resultados satisfatórios na análise de ferro e fosfato, demonstrando assim que dentro dessa etapa o equipamento já pode contribuir, otimizando tempo e reduzindo o consumo de energia. Contudo, a estratégia de análise de MO, de uma forma direta, ou seja, sem filtragem ou qualquer outra preparação, não possibilitou resultados adequados.

Já a avaliação com a metodologia RGB 12 da WAC, realizada no Specket, fornece uma visualização de que nos critérios econômicos e práticos, tem-se um equipamento que fará uma grande diferença no dia a dia dos laboratórios. Nos critérios ambientais, principalmente com a redução do consumo de energia, já colabora com indicadores de sustentabilidade, demonstrando que em seu caminho futuro, possa melhorar o seu desempenho ambiental, principalmente na determinação de matéria orgânica. Destaca-se, ainda, que o equipamento terá que melhorar sua

avaliação nos princípios vermelhos, onde a sua precisão analítica deverá ter resultados mais satisfatórios. Já existem estratégias adicionadas aos trabalhos futuros, como a troca de LEDs e sensores, que pode ser um quesito a ser verificado, como também outras metodologias podem ser observadas. Contudo, mesmo com a suas limitações, o equipamento apresentou um baixo custo totalizando 60,00 USD.

Por fim, respondendo o nosso questionamento inicial na concepção desse projeto do equipamento, que foi desenvolvido com um olhar através dos princípios da WAC, finaliza-se descrevendo que, sim, ele pode contribuir com o ESG, e entregar diversas vantagens nos diferentes fatores e princípios estudados nessa tese.

## 7 TRABALHOS FUTUROS

O equipamento desenvolvido se mostrou muito prático, possuindo portabilidade necessária para trabalhos rápidos de análises e também para tomada de decisões. Podendo reduzir custos, como também a gerar menos resíduos. Este trabalho já representa um grande avanço, pois o equipamento e seu *software*, já são uma realidade. O que evidência é a necessidade de novos ajustes, um “polimento” ou melhor alguns ajustes na “sintonia mais fina”, como por exemplo:

- a) No LED RGB, pode ser novamente testada a leitura de fluoreto em faixas mais altas, como também a troca peças por outras mais robustas, pode ser uma melhoria. Tanto o LED RGB, quanto o sensor luminosidade LDR, podem possibilitar os resultados esperados;
- b) Outro trabalho futuro a ser considerado, é utilizar o LED RGB em outras espécies químicas e seus reagentes, isso abriria mais a gama de oportunidades do Specket;
- c) No LED UV, existe a possibilidade de realizar os testes filtrando as amostras, isso pode fazer com que os resultados fiquem dentro do esperado. Obteve-se respostas inadequadas nos dois equipamentos, o que nos demonstrou a adoção da estratégia errada, ao tentar fazer de uma forma direta, sem filtragem, o que não nos propiciou bons resultados.
- d) Avaliar também a troca do LED UV, como também do módulo de detecção para equipamentos mais robusto. Isso pode contribuir para melhores resultados;
- e) Por fim, uma alternativa que foi abandonada no início da pesquisa, quando testou-se a determinação de amostras de efluentes, a diminuição do caminho óptico foi testada. Mas não se validou essa possibilidade para águas superficiais.

## **8 ATIVIDADES REALIZADAS DURANTE O DOUTORADO**

- Participação no Curso de Análise de Componentes Principais: Fundamentos e Aplicações, UTFPR/PR (06 de outubro de 2020);
- Participação da 30ª Mercopar, Caxias/RS (05 a 07 de outubro de 2021);
- Organização do 1º Plogging da Semana Lixo Zero, Santa Cruz do Sul/RS, (30 de outubro de 2021);
- Participação do 1º Rio Innovation Week, Rio de Janeiro/RJ (13 a 17 de janeiro de 2022);
- Participação do Gramado Summit 2022, Gramado/RS (06 a 08 de abril de 2022);
- Participação do Curso de Elaboração de Artigos Científicos para Revistas de Alto Fator de Impacto, UFPE/PE (24 de abril de 2022);
- Participação do 1º South Summit Brasil, Porto Alegre/RS (04 a 06 de maio de 2022);
- Organização da Volta ao Lago Dourado, alusivo a Semana do Meio Ambiente, Santa Cruz do Sul/RS (04 de junho de 2022);
- Participação do Startup Summit 2022, Florianópolis/SC (04 a 05 de agosto de 2022);
- Apresentação de resultados iniciais da pesquisa no 20º ENQA/8º CIAQA, Bento Gonçalves, (25 a 28 de setembro de 2022);
- Participação da 31ª Mercopar, Caxias/RS (18 a 21 de outubro de 2022);
- Organização do 2º Plogging da Semana Lixo Zero, Santa Cruz do Sul/RS, (22 de outubro de 2022);
- Participação do 2º Rio Innovation Week, Rio de Janeiro/RJ (8 a 11 de novembro de 2022);
- Participação do 2º South Summit Brasil, Porto Alegre/RS (29 a 31 de março de 2023);
- Participação do Gramado Summit 2023, Gramado/RS (12 a 14 de abril e 2023);
- Participação do 1º Web Summit Brasil, Rio de Janeiro/RJ (01 a 04 de maio de 2023);
- Participação da 10ª Fiema Brasil, Bento Gonçalves/RS (9 a 11 de maio de 2023)
- Organização da Caminhada Ecológica, alusiva a Semana do Meio Ambiente, Santa Cruz do Sul/RS (3 de junho de 2023);
- Participação da 2ª Feira Mineira de Resíduos, Belo Horizonte (9 a 10 de agosto de 2023);
- Participação do Startup Summit 2023, Florianópolis/SC (23 a 25 de agosto de 2023);
- Participação da Waste Expo Brasil e Fenasan, São Paulo (3 a 5 de outubro de 2023);
- Participação da 32ª Mercopar, Caxias/RS (17 a 20 de outubro de 2023);

- Organização do 3º Plogging da Semana Lixo Zero, Santa Cruz do Sul/RS, (28 de outubro de 2023);
- Participação da 2ª Feira Brasileira do Grafeno, Caxias/RS (13 a 14 de novembro de 2023);
- Organização e apresentação no Workshop – Novas Tecnologias para Análises Agronômicas, UNISC/RS (21 de novembro de 2023);
- Participação do 3º South Summit Brasil, Porto Alegre/RS (09 a 11 de abril de 2024);
- Participação do 2º Web Summit Brasil, Rio de Janeiro/RJ (15 a 18 de abril de 2024);
- Participação da IFAT Brasil, São Paulo/SP (24 a 26 de abril de 2024);
- Organização do Desafio Solidário em alusão a Semana do Meio Ambiente, Santa Cruz do Sul (08 de junho de 2024);
- Participação do Startup Summit 2024, Florianópolis/SC (14 a 16 de agosto de 2024);
- Participação da 3ª Feira Mineira de Resíduos, Belo Horizonte (28 a 29 de agosto de 2024);
- Participação da Feevale Summit, Novo Hamburgo/RS (02 de outubro de 2024);
- Participação da Conexão Origem Sustentável, Taquara/RS (15 de outubro de 2024);
- Participação da 33ª Mercopar, Caxias/RS (15 a 18 de outubro de 2024);
- Organização do 4º Plogging da Semana Lixo Zero, Santa Cruz do Sul/RS, (19 de outubro de 2024);
- Waste Expo Brasil e Fenasan, São Paulo (22 a 24 de outubro de 2024);
- Health Meeting, Business & Innovation, Porto Alegre (11 a 13 de novembro de 2024);
- 28 episódios de podcast falando sobre ESG, Resíduos e Inovação;
- Escrita, submissão e seleção no FINEP no Edital: SELEÇÃO PÚBLICA MCTIC/FINEP/FNDCT Subvenção Econômica à Inovação – 04/2020 Tecnologias 4.0, com o projeto: Solução tecnológica que integra *hardware* e *software* para gerenciamento interno de coleta de resíduos gerados em instituições de saúde;
- Escrita, submissão e seleção no EGII - Edital Gaúcho para inovação na Indústria 2021 (SENAI/SEBRAE) com o projeto - mR1b - Dispositivo para operacionalizar a coleta de resíduos;
- Escrita, submissão e seleção no EGII - Edital Gaúcho para inovação na Indústria 2022 (SENAI/SEBRAE) com o projeto - mRETE 1.0 -Dispositivo para gerenciar dados de Estação de tratamento de Efluentes Industriais;



- Escrita, submissão e seleção no EMBRAPPII, chamamento público de apresentação de Projetos de Fluxo Contínuo, com o projeto - LUCIA: Logística Otimizada para uma Coleta de Resíduos com IA;
- 10 dias trabalhados no laboratório da UFSM em relação à pesquisa;
- 32 dias de trabalho no espectro de referência da Unisc testando reagentes e amostras.

## 9 REFERÊNCIAS

- AI, H. ZHANG, K. ZHANG, H. Efficient smartphone-based measurement of phosphorus in water. **Water Research X.** v. 22, p. 100217, 2024. <https://doi.org/10.1016/j.wroa.2024.100217>.
- ALBREKTIENE, R. *et. al.* Determination of organic matter by UV absorption in the ground Water. **Taylor & Francis,** v. 20, p. 163-167, 2012. <https://doi:10.3846/16486897.2012.674039>.
- AGENDA FOR DEVELOPMENT: resolution / adopted by the General Assembly. New York, EUA, 1997. <https://digitallibrary.un.org/record/245092?v=pdf>. Acesso em: 28/02/2024.
- ANASTAS, P.T. Green chemistry and the role of analytical methodology development. **Crit. Rev. Anal. Chem.** v. 29, p. 167–175, 1999. <https://doi.org/10.1080/10408349891199356>.
- ANASTAS, P. T. ZIMMERMAN, J. B. Design through the twelve principles of green engineering. **Environ. Sci. Technol.** v. 37, p. 94A – 101A, 2003. <https://doi.org/10.1021/es032373g>.
- ANASTAS, P. T. ZIMMERMAN, J. B. The Twelve Principles of Green Engineering as a Foundation for Sustainability. *Sustainability Sci. and Eng.* p. 11-32, 2006. [https://doi.org/10.1016/S1871-2711\(06\)80009-7](https://doi.org/10.1016/S1871-2711(06)80009-7).
- ANASTAS, P.T. EGHBALI N. Green chemistry: principles and practice, **Chem. Soc. Rev,** v. 39, p. 301-312, 2010. <https://doi.org/10.1039/B918763B>.
- ANDRADE, J. C. ALVIN, T. R. Basic analytical chemistry: a historical view of classical qualitative analysis, **Chemkeys,** V. 9, p. 1-8, 2009. <https://doi.org/10.20396/chemkeys.v0i9.9643>.
- APHA, Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater – SMEWW. American Public Health Association – APHA, 21th ed., Washington – USA, 2017. <https://doi.org/10.2105/SMWW.2882.004>.
- ARMENTA, S. GARRIGUES, S. DE LA GUARDIA, M. Green analytical chemistry, **Trends Anal. Chem.** v. 27, p. 497–511, 2008. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2008.05.003>.
- AYDOGMUS, M. GÜLAY, G. ERGUN, K. Impact of ESG performance on firm value and profitability, **Borsa Istanbul Review.** v. 20, p. 119-127, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.bir.2022.11.006>.
- BAUMANN, L. *et. al.* NanoMetrix: an app for chemometric analysis from near infrared spectra, **Journal of Chemometrics.** v. e3281, p. 1-9 2020. <https://doi.org/10.1002/cem.3281>.

- BENDICHO, C. *et. al.* Ultrasound-assisted pretreatment of solid samples in the context of green analytical chemistry. **TrAC Trends in Analytical Chemistry**. v. 31, p. 50-60, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2011.06.018>.
- BRASIL. Conselho Nacional do Meio Ambiente. Resolução CONAMA nº 357, de 17 de março de 2005. Dispõe sobre a classificação dos corpos de água e diretrizes ambientais para o seu enquadramento, bem como estabelece as condições e padrões de lançamento de efluentes. Diário Oficial da União, Brasília, DF, 18 mar. 2005. Disponível em: [https://www.icmbio.gov.br/cepsul/images/stories/legislacao/Resolucao/2005/res\\_conama\\_357\\_2005\\_classificacao\\_corpos\\_agua\\_rtfcd\\_a\\_altrd\\_res\\_393\\_2007\\_397\\_2008\\_410\\_2009\\_430\\_2011.pdf](https://www.icmbio.gov.br/cepsul/images/stories/legislacao/Resolucao/2005/res_conama_357_2005_classificacao_corpos_agua_rtfcd_a_altrd_res_393_2007_397_2008_410_2009_430_2011.pdf). Acesso em 7 de outubro de 2024.
- CERDA, V. PHANSI, P. FERREIRA, S. From mono- to multicomponent methods in UV-VIS spectrophotometric and fluorimetric quantitative analysis - A review. **Trends in Analytical Chemistry**. v. 157, p. 116772, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2022.116772>.
- CIZEK, A. R. *et. al.* Insights from using in-situ ultraviolet–visible spectroscopy to assess nitrogen treatment and subsurface dynamics in a regenerative stormwater conveyance (RSC) system. **Journal of Environmental Management**. p. 252, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2019.109656>.
- COSTA, A. B da. *et. al.* Desfluoretação de águas subterrâneas utilizando filtros de carvão ativado de osso. **Águas Subterrâneas**, v. 27, p. 60-70, 2013. <https://doi.org/10.14295/ras.v27i3.27382>.
- ELKINGTON, J. Towards the sustainable corporation: Win-win-win business strategies for sustainable development. **Calif. Manage. Rev.** v. 36, p. 90-100, 1994. <https://doi.org/10.2307/41165746>.
- DA SILVA, I. C. *et. al.* Fast and low-cost method for direct and simultaneous determination of nitrogen and carbon in soybean leaves using benchtop and portable near-infrared devices. **J. Sci. Food Agric**. v. 104, p. 1843-1852, 2024. <https://doi.org/10.1002/jsfa.13022>.
- DE ANDRADE, J. C. ALVIN, T. R. Química analítica básica: uma visão histórica da análise qualitativa clássica, **Chemkeys**. v. 9, p. 1-8, 2009. <https://doi.org/10.20396/chemkeys.v0i9.9643>.
- DE JESUS, J. R. *et. al.* Applications of smartphones in analysis: challenges and solutions –In: Hussain, C. M. Smartphone-Based detection devices: emerging trends in analytical techniques, Elsevier. p. 199-248, 2021. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-823696-3.00009-X>.
- DE LA GUARDIA, M. ARMENTA, S. Origins of green analytical chemistry, **Comprehensive Anal. Chem.** v. 57, p. 1-23 2011. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-53709-6.00001-X>.
- DO SANTOS, R. B. *et. al.* Flow thermal infrared enthalpimetry: rapid and inexpensive determination of the alcohol content of distilled beverages, **Talanta**. v. 200, p. 67-71 2019. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2019.03.044>.

- FERREIRA, M. M. C. Quimiometria - conceitos, métodos e aplicações. Campinas/SP: Editora da Unicamp. 2015.
- FILODA, P. F. *et al.* Fast methodology for identification of olive oil adulterated with a mix of different vegetable oils. *Food Analytical Methods*. v. 12, p. 293-304, 2019. <https://doi.org/10.1007/s12161-018-1360-5>.
- GALUSZKA, A. MIGASZEWSKI, Z. NAMIESNIK, J. The 12 principles of green analytical chemistry and the SIGNIFICANCE mnemonic of green analytical practices, **Trac. Trends Anal. Chem.** v. 50, p. 78-84, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2013.04.010>.
- GEERDINK, R. B. VAN DEN HURK, R. S. EPEMA, O. J. Chemical oxygen demand: Historical perspectives and future challenges. **Analytical Chimica Acta**. v. 961, p. 1-11, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2017.01.009>.
- GIBSON, R. B. Specification of sustainability-based environmental assessment decision criteria and implications for determining “significance” in environmental assessment; **Paper prepared under a contribution agreement with the Canadian Environmental Assessment Agency Research and Development Programme**, Ottawa, Canada, 2001. <https://publications.gc.ca/site/eng/241764/publication.html>. Acesso em: 08/03/2024.
- GILLAN, S. L. KOCH, A. & STARKS, L. T. Firms and social responsibility: A review of ESG and CSR research in corporate finance, **Journal of Corporate Finance**. v. 66, p. 101889, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.jcorpfin.2021.101889>
- GONZATTI, C. A. At-line monitoring of industrial corn seed classification quality by digital images analysis using smartphone. *J. Food Process Eng.* v. 45:e14099, p. 1-9, 2022. <https://doi.org/10.1111/jfpe.14099>.
- GRIEBLER, C. AVRAMOV, M. Groundwater ecosystem services: a review Groundwater ecosystem services: a review. **Freshwater Science**, v. 34, p. 355-367, 2015. <https://doi.org/10.1086/679903>.
- HERRERA-MELIÁN, J. A. *et al.* Incidence of pretreatment by potassium permanganate on hazardous laboratory wastes photodegradability. **Water Research**, v. 34, p. 3967-3976, 2000. [https://doi.org/10.1016/S0043-1354\(00\)00146-9](https://doi.org/10.1016/S0043-1354(00)00146-9).
- KANG, J. O. Chronic iron overload and toxicity: clinical chemistry perspective. *Clin Lab Sci*, v. 14, p. 209, 2001.
- KHATRIA, N. TYAGIA, S. RAWTANIB, D. Recent strategies for the removal of iron from water: A review. **Journal of Water Process Engineering**. v. 19, p. 291–304, 2017. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jwpe.2017.08.015>.
- KOEL, M. KALJURAND, M. Application of the principles of green chemistry in analytical chemistry, **Pure and Applied Chemistry**, v. 78, p. 1993-2002, 2006. <https://doi.org/10.1351/pac200678111993>.

- KUHLMANN, T. FARRINGTON, J. What is Sustainability?. **Sustainability**, v. 2, p. 3436-3448, 2010. <https://doi.org/10.3390/su2113436>.
- KUROWSKA-SUSDORF, A. Green analytical chemistry: Social dimension and teaching. **Trends in Analytical Chemistry**, v. 111, p. 185-196, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2018.10.022>.
- LITVINENKO, V. *et. al.* Global guidelines and requirements for professional competencies of natural resource extraction engineers: Implications for ESG principles and sustainable development goals. **Journal of Cleaner Production**. v. 338 2022. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.130530>.
- LÓPEZ-LORENTE, *et al.* The ten principles of green sample preparation. **Trends in Analytical Chemistry**. v. 148, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2022.116530>.
- LYNDGAARD, C. B. *et. al.* Moving from recipe-driven to measurement-based cleaning procedures: Monitoring the Cleaning-In-Place process of whey filtration units by ultraviolet spectroscopy and chemometrics. **Journal of Food Engineering**. v. 126, p. 82-88, 2014. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2013.10.037>.
- MALISSA, H. in: ROTH, E. (Editor). Reviews on analytical chemistry, **Euroanalysis VI**, Les éditions de physique, Paris, France, p. 49–64, 1987.
- MARCINKOWSKA, R. NAMIESNIK, J. TOBISZEWSKI, M. Green and equitable analytical chemistry, **Curr. Opin. Green Sustain. Chem.** v. 19, p. 19-23, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.cogsc.2019.04.003>.
- MATILAINEN, A. SILLANPÄÄ, M. Removal of natural organic matter from drinking water by advanced oxidation processes. **Chemosphere**. v. 80, p. 351–365, 2010. <https://10.1016/j.chemosphere.2010.04.067>.
- MEENAKSHI, Y. MAHESHWARI, R. C. Fluoride in Drinking Water and Its Removal. **Journal Hazardous Matter**, v. 137, p. 456-463, 2006. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2006.02.024>.
- MILANI, D. C. B. NIENCHESKI, L. F. H. MILANI, M. R. Minimização da contaminação na determinação de metais traços em águas naturais. **Vetor**. v. 15, p. 93-99, 2005. Disponível em: <https://periodicos.furg.br/vetor/article/view/236/23>. Acesso: 12/10/2024.
- MISHRA, B. K. *et. al.* Water security in a changing environment: Concept, challenges and solutions. **Water**, v. 13, p. 490, 2021. <https://doi.org/10.3390/w13040490>.
- NAMIEŚNIK, J. Trends in environmental analytics and monitoring, **Crit. Rev. Anal. Chem.** v. 30, p. 221–269, 2000. <https://doi.org/10.1080/10408340091164243>.
- NETO, B. de B. *et. al.* Como fazer Experimentos: pesquisa e desenvolvimento na ciência e na indústria. 3ª ed, Campinas, SP: Editora da Unicamp, 2007.

- NOLASCO, F. R. TAVARES, G. A. BENDASSOLLI, J. A. Implantação de programas de gerenciamento de resíduos químicos laboratoriais em universidades: Análise crítica e recomendações. **Eng. Sanit. Ambient.** v. 11, p. 118 – 124, 2006. <https://doi.org/10.1590/S1413-41522006000200004>.
- NOWAK, P. M. *et. al.* Overview of the three multicriteria approaches applied to a global assessment of analytical methods *Trac. Trends Anal. Chem.* v. 116065, p. 1-38, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2020.116065>.
- NOWAK, P. M. WIETecha-POŚLUSZNY, R. PAWLISZYN, J. White Analytical Chemistry: An approach to reconcile the principles of Green Analytical Chemistry and functionality. **Trends in Analytical Chemistry**, v. 138, p. 116223, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2021.116223>.
- NOWAK, P. M. ARDUINI, F. RGBfast – A user-friendly version of the Red-Green-Blue model for assessing greenness and whiteness of analytical methods. *Green Anal. Chem.* v. 10, p. 100120, 2024. <https://doi.org/10.1016/j.greeac.2024.100120>.
- PASQUINI, C. Espectroscopia no infravermelho próximo: Fundamentos, aspectos práticos e aplicações analíticas. **J. Braz. Chem. Soc.** p. 198-219, 2003. <https://www.alice.cnptia.embrapa.br/alice/bitstream/doc/1106595/1/ID445392018LVespectroscopia.pdf>. Acesso: 08/03/2024.
- PAPIS, Cristiane. *et. al.* Point-of-use determination of fluoride and phosphorus in water through a Smartphone using the PhotoMetrix® App. **Br. J. Anal. Chem.** v. 6, p. 58-66, 2019. <https://10.30744/brjac.2179-3425.TN-25-2019>.
- PENATTI, F. E. LIMA-GUIMARÃES, S. T. Avaliação dos riscos e problemas ambientais causados pela disposição incorreta de resíduos de laboratórios. **Geografia Ensino & Pesquisa**, v. 15, p. 43 – 52, 2011. <https://doi.org/10.5902/223649947376>.
- PENA-PEREIRA, F.; WOJNOWSKI, W.; TOBISZEWSKI, M. AGREE – Analytical GREENness metric approach and software. *Anal. Chem.* p. 1-29, 2020. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.0c01887>.
- PIMENTEL, G. Opportunities in Chemistry, **National Academy Press**, Washington DC, EUA, 1985.
- PONTES, A. S. Desenvolvimento de um fotômetro LED-Vis portátil e microcontrolado por Arduino. 2014. 95 f. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2014. Disponível em: <https://repositorio.ufpb.br/jspui/handle/tede/7136>. Acesso em 7 de outubro de 2024.
- PRIYA, T. MISHRA, B. K. Enzyme Mediated Chloroform Biotransformation and Quantitative Cancer Risk Analysis of Trihalomethanes Exposure in South East Asia. **Expo Health**, v. 9, p. 61-75, 2017. <https://doi.org/10.1007/s12403-016-0212-z>.

- REN, Y. *et. al.* Recent advances in electrochemical removal and recovery of phosphorus from water: A review. **Environmental Functional Materials** **1**. p. 10–20, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.efmat.2022.04.003>.
- TANG, S. L. Y.; SMITH, R. L.; POLIAKOFF, M. Principles of green chemistry: PRODUCTIVELY, **Green Chemistry**. v. 7, p. 761-762, 2005. <https://doi.org/10.1039/B513020B>.
- THOMSON, J. RODDICK, F. A. & DRIKAS, M. Vacuum ultraviolet irradiation for natural organic matter removal. **Journal of Water Supply: Research and Technology-Aqua**, v. 53, p. 193-206, 2004. <https://doi.org/10.2166/aqua.2004.0017>.
- UNESCO, Relatório Mundial das Nações Unidas sobre o Desenvolvimento do Recursos Hídricos 2022. Águas Subterrâneas: Tornar visível o invisível – Resumo executivo. Colombella, Perúgia, Itália, 2022. Disponível em: [https://unesdoc.unesco.org/ark:/48223/pf0000380726\\_por](https://unesdoc.unesco.org/ark:/48223/pf0000380726_por). Acesso: 20/11/2024.
- UNITED NATIONS (UN); Agenda for Development: Resolution Adopted by the General Assembly; UN: New York, 1997. Disponível em: <https://digitallibrary.un.org/record/245092?v=pdf#files>. Acesso em 16 de Outubro de 2024.
- WANG, C. LI, W. HUANG, M. High precision wide range online chemical oxygen demand measurement method based on ultraviolet absorption spectroscopy and full-spectrum data analysis. **Sensors and Actuators B: Chemical**, v. 300, p. 126943, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2019.126943>.
- WESSLING-RESNICK, Marianne. Excess iron: considerations related to development and early growth. **The American Journal of Clinical Nutrition**, v. 106, p.1600S-1605S, 2017. <https://doi.org/10.3945/ajcn.117.155879>.
- WIECZERZAK, M. NAMIEŚNIK, J. KUDŁAK, B. Bioassays as one of the Green Chemistry tools for assessing environmental quality: A review. **Environment International**, v. 94, p. 341-361, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2016.05.017>.
- WORLD HEALTH ORGANIZATION. Guidelines for drinking-water quality [electronic resource]: incorporating 1st and 2nd addenda, Vol. 1, Recommendations. – 3rd ed. Geneva, 2008. Disponível em: <https://iris.who.int/rest/bitstreams/907844/retrieve>. Acesso em 16 de outubro de 2024.
- WORLD COMMISSION ON ENVIRONMENT AND DEVELOPMENT (WCED). Our Common Future, Oxford University Press: New York, NY, USA, 1987. Disponível em <https://sustainabledevelopment.un.org/content/documents/5987our-common-future.pdf>. Acesso em 16 de outubro de 2024.
- XING, Y. *et. al.* A dual-functional smartphone-based sensor for colorimetric and chemiluminescent detection: A case study for fluoride concentration mapping. **Sensors**

**& Actuators: B. Chemical**, v. 319, p. 128254, 2020.  
<https://doi.org/10.1016/j.snb.2020.128254>.

YANG, D. YANG, Y. XIA, J. Hydrological cycle and water resources in a changing world: A review, **Geography and Sustainability**, v. 2, p. 115-122, 2021.  
<https://doi.org/10.1016/j.geosus.2021.05.003>.

ZHENG, T. RAN, Y. CHEN, L. Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in rural soils of dongjiang river basin: occurrence, source apportionment, and potential human health risk, **J Soils Sediments**, v. 14, p. 110-120, 2014. <https://doi.org/10.1007/s11368-013-0753-8>.

ZHU, X, et. al. Assessment of a portable UV–Vis spectrophotometer’s performance for stream water DOC and Fe content monitoring in remote areas, **Talanta**. v. 224, p. 121919, 2021.  
<https://doi.org/10.1016/j.talanta.2020.121919>.





PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO  
MESTRADO E  
DOUTORADO  
**TECNOLOGIA  
AMBIENTAL**



Av. Independência, 2293 - Universitário  
Santa Cruz do Sul - RS  
CEP 96815-900

(51) 3717-7300  
[www.unisc.br](http://www.unisc.br)