

Abordagem verde a partir de otimização multivariada e uso de solventes eutéticos profundos naturais na determinação multielementar em matrizes vegetais

Helena Bezerra Ferrari (PG)^{1*}, Luana Santos Moreira (PQ)¹, Geisamanda Pedrini Brandão (PQ)¹, Maria Tereza Weitzel Dias Carneiro (PQ)¹

helenabferrari@gmail.com

¹Universidade Federal do Espírito Santo (UFES), Departamento de Química, Laboratório de Espectrometria Atômica (LEA)/LabPetro, Vitória, ES, Brasil, 29075-910.

Palavras Chave: NADES, UAE, otimização, GAC, espectrometria

Introdução

Os solventes eutéticos profundos naturais (NADES) formados por combinações estequiométricas de sais de colina, ácidos orgânicos e açúcares, apresentam baixa volatilidade e toxicidade, além de serem biodegradáveis, tornando-se uma alternativa aos ácidos minerais na extração de elementos químicos de amostras vegetais e atendendo aos princípios da Química Analítica Verde (GAC).¹ Esses solventes podem ser combinados com a extração assistida por ultrassom (UAE) que, no preparo de amostras, apresenta vantagens relacionadas à simplicidade, baixo custo e segurança. Para atingir uma condição ótima em um método, a otimização multivariada é um excelente caminho que auxilia, principalmente, na redução do número de experimentos a serem realizados.¹ Dessa forma, o objetivo deste estudo foi o desenvolvimento de um método verde para determinação elementar utilizando otimização multivariada no preparo de amostra de tecidos vegetais a partir da UAE-NADES.

Resultados e Discussão

Na abordagem UAE-NADES, o solvente avaliado resulta da combinação de cloreto de colina (ChCl), ácido oxálico (Ox) e água na proporção 1:1:1. Otimização multivariada foi utilizada para atingir uma condição ótima de uma extração a 80 °C por 40min com 3 mL de solvente. A exatidão foi avaliada ao usar material de referência certificado de folha de pêssego (*Peach Leaves*, NIST 1547), folha de tomate (*Tomato Leaves*, NIST 1573a) e material de referência *Brachiaria brizantha* cv. Marandu (E1001a), com concordância entre 73% e 90% para Fe e Mn e 80% e 107% para As, Cd, Cu, Pb e Zn, que são considerados satisfatórios de acordo com os limites estabelecidos pela AOAC International.² A precisão foi avaliada pelo desvio padrão relativo (RSD, n = 9), com valores <10,0%. Os limites de quantificação (mg kg⁻¹) foram: 0,021 (As), 0,019 (Cd), 0,16 (Cu), 9,70 (Fe), 3,23 (Mn), 0,062 (Pb) e 2,12 (Zn). O método de decomposição ácida assistida por micro-ondas (MW-AD) foi usado como método de referência/comparativo. Métricas como AGREE e AGREEprep foram utilizadas para demonstrar o caráter ecológico da metodologia UAE-NADES, com valores de 0,68 e 0,58, respectivamente.^{3,4}

Conclusões

Por meio deste estudo, obteve-se um solvente ecologicamente correto, capaz de realizar a extração de As, Cd, Cu, Fe, Mn, Pb e Zn. A utilização dos NADES estabeleceu parâmetros analíticos condizentes com o método de extração proposto validando-o como uma alternativa viável ao convencional MW-AD. O uso de planejamento experimental foi essencial para atingir uma condição ótima para o método e chegar a resultados relevantes que são compatíveis aos valores de referência. O UAE-NADES mostrou ser um método de preparo de amostras seguro, de aplicação simples e eficaz, e em perfeita sintonia com os princípios da GAC.

Agradecimentos

FAPES, CAPES, CNPq, PMBA-FEST/Renova, LabPetro/UFES e PPGQUI/CCE/UFES

¹Omar, K. A., Sadeghi, R. *Journal of Molecular Liquids*, v. 384, p. 121899, 2023.

²AOAC, Association of Official Analytical Chemists, *Official Methods of analysis of AOAC International*, 2005.

³Pena-Pereira F, Wojnowski W, Tobiszewski M, *Analytical Chemistry*, 92, 2020, 10076.

⁴Wojnowski W, Tobiszewski M, Pena-Pereira F, Psillakis E, *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 149, 2022, 116553.