

1

Considerações gerais e objetivos

As microemulsões sem detergente (MESD) podem representar uma alternativa na determinação fosforimétrica à temperatura ambiente (FTA) de substâncias orgânicas em amostras imiscíveis em água. As microemulsões (ME's) são geralmente definidas como sistemas termodinamicamente estáveis, isotrópicos e transparentes, de dois líquidos imiscíveis estabilizados por agentes tensoativos ou por um solvente comum aos dois componentes imiscíveis¹. Essas ME's são ainda classificadas em função da ausência ou da presença de detergente no meio. As ME's com detergente vêm sendo utilizadas em métodos baseados na FTA de hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (HPA's) diretamente em solução². Elas provêm um microambiente que protege parcialmente as moléculas do analito, minimizando significativamente os processos de desativação não-radiativa, e conseqüentemente aumentando a eficiência quântica fosforescente (ϕ_p), parâmetro de grande importância na espectrofotometria³. No caso das MESD, nenhum método analítico foi descrito na literatura usando essa abordagem⁴⁻⁷.

A aplicação das MESD na FTA representa um híbrido entre duas técnicas fosforescentes, pois nela se combinam as vantagens do meio organizado por micelas de detergentes (FTA-ME) com as da indução da fosforescência por átomo pesado (FTA-IAP) diretamente em solução. O uso das MESD oferece a vantagem de permitir a caracterização fosforimétrica de substâncias hidrofóbicas, principal limitação da FTA em solução aquosa, o que representaria uma nova estratégia de análise que poderia ser aplicada em diferentes campos de interesse analítico, tais como o ambiental, e o clínico-farmacêutico. Esta estratégia é atrativa, pois as técnicas luminescentes, do ponto de vista de aquisição e manutenção do equipamento, são relativamente baratas, e as metodologias são simples e, quando adequadamente otimizadas, oferecem grande seletividade e sensibilidade⁸.

O desenvolvimento de uma metodologia analítica espectrofotométrica para a determinação de hidrocarbonetos poliaromáticos nitrogenados e sulfurados presentes em diferentes tipos de amostras (água, sedimento, derivados líquidos de

petróleo) precisa da otimização da resposta fosforimétrica com o objetivo de estabelecer as melhores condições experimentais. Desde o final da década de 90 têm sido aplicadas às técnicas quimiométricas de planejamento fatorial e da metodologia da superfície de resposta na otimização dos modelos para os diferentes sistemas em estudo. O objetivo era o de descobrir a influência dos fatores e a interação entre os mesmos na resposta analítica. Em termos de técnicas fosforimétricas, esta abordagem tem sido muito pouco explorada⁹⁻¹¹. Este trabalho tem como objetivo principal o desenvolvimento de uma metodologia analítica espectrofotométrica na temperatura ambiente e em solução para a determinação de duas substâncias policíclicas aromáticas, uma nitrogenada (carbazol) e outra sulfurada (dibenzotiofeno), presentes em meios orgânicos imiscíveis com água: derivados líquidos de petróleo (gasolina e querosene), e em extratos de água e de sedimento. Objetivos específicos são listados abaixo:

- Otimizar as condições para a obtenção de MESD estáveis contendo líquidos orgânicos (alcanos acíclicos na faixa de oito e de dezesseis carbonos).
- Avaliar a possibilidade e traçar estratégias para viabilizar o uso dessas MESD em fosforimetria.
- Usar as técnicas quimiométricas de planejamento fatorial e da metodologia da superfície de resposta na otimização das condições de trabalho para as variáveis independentes da metodologia desenvolvida.
- Obter parâmetros de mérito para validação parcial da metodologia.
- Avaliar a aplicação da metodologia e traçar estratégias para a determinação desses HPA's em diferentes amostras.