

1. Introdução

Esta ficha informativa aborda as convenções de nomenclatura de algumas das PFAS mais comumente reportadas, considerando o uso histórico, o estado atual da pesquisa científica sobre ocorrência ambiental e análises comerciais disponíveis. Para consultar as convenções de nomenclatura adicionais relacionadas a PFAS, consulte Buck *et al.* (2011).

A família de PFAS pode ser dividida em duas classes principais: polímeros e não polímeros, conforme mostrado abaixo na **Figura 1**. Futuras atualizações da “árvore genealógica” e da nomenclatura são esperadas devido ao crescente conhecimento público desses compostos.

Esta ficha informativa concentra-se principalmente na classe dos PFAS não polímeros mais comumente detectada no meio ambiente. Informações adicionais estão disponíveis no Documento de Orientação.

2 PFAS Não Polímeros

A classe não polimérica de PFAS engloba duas subclasses principais: substâncias perfluoroalquiladas e substâncias polifluoroalquiladas, que incluem muitos grupos e subgrupos de produtos químicos, exemplos dos quais estão mostrados na **Figura 1**. Esses compostos foram selecionados como principal enfoque do Documento de Orientação, uma vez que: (1) são os mais comumente detectados (até o momento) em humanos, na biota e outras matrizes ambientais; (2) parecem ser relativamente mais abundantes em áreas contaminadas com investigação de PFAS; (3) podem ter dados disponíveis sobre os potenciais efeitos ecológicos e à saúde humana decorrentes da exposição ambiental; (4) podem ter valores de intervenção internacionais e futuramente, estaduais e federais; e/ou (5) estão incluídos na maioria das listas laboratoriais de analitos PFAS.

O ITRC desenvolveu uma série de fichas informativas que resumem a ciência recente e tecnologias emergentes referentes a PFAS. As informações apresentadas nesta ficha informativa e nas demais sobre PFAS estão descritas em maiores detalhes no **PFAS Technical and Regulatory Guidance Document** do ITRC (**Documento de Orientação**) (<https://pfas-1.itrcweb.org/>).

Essa ficha informativa descreve os métodos usados para classificação de PFAS encontrados no meio ambiente, incluindo:

- PFAS Polímeros e Não Polímeros
- Ácidos Perfluoroalquilados
- PFAS de Cadeias Longa e Curta
- Substâncias Polifluoroalquiladas
- PFAS Lineares x Ramificados
- Ácidos x Ânions

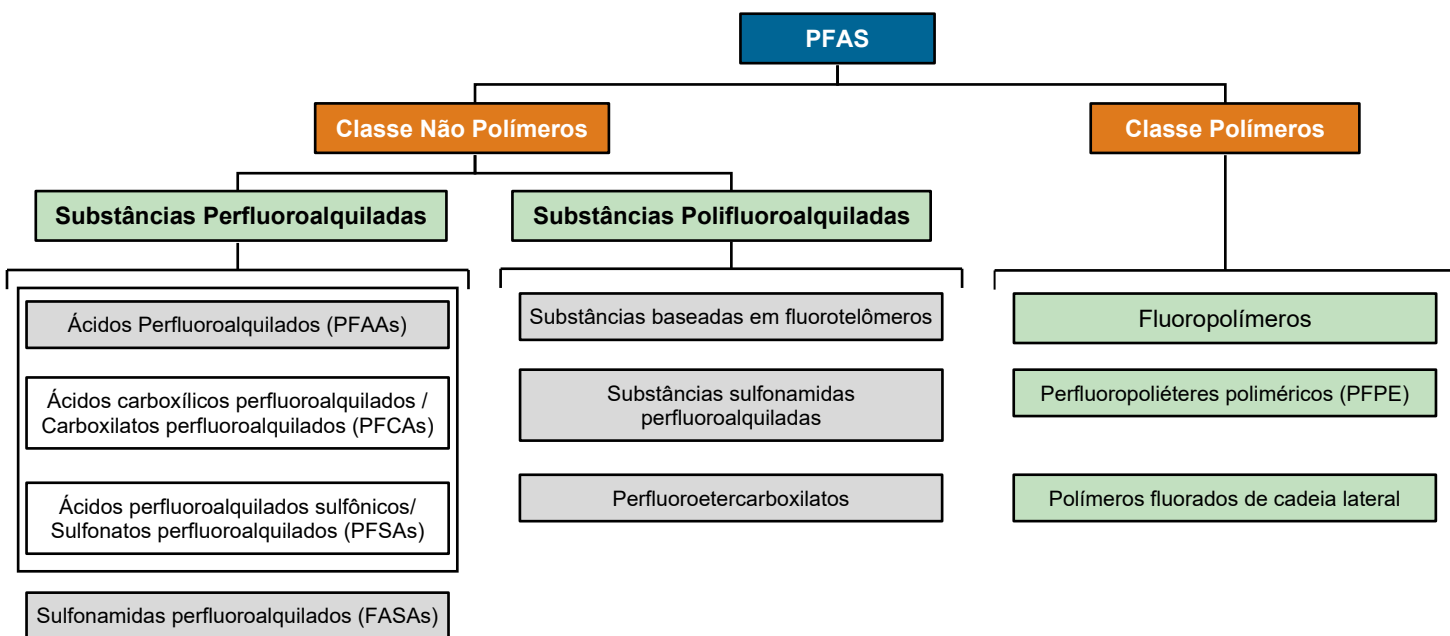
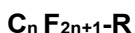


Figura 1. Resumo da família de substâncias PFAS

Substâncias Perfluoroalquiladas

As substâncias perfluoroalquiladas são moléculas totalmente fluoradas (perfluoro-) alquiladas (cadeia de carbono). Sua estrutura química básica é composta de uma cadeia (ou “cauda”) de dois ou mais átomos de carbono com um grupo funcional carregado (ou “cabeça”) ligado a uma extremidade. Normalmente, os grupos funcionais são carboxílicos ou sulfônicos, mas outras formas também são detectadas no meio

ambiente. Esta estrutura, que é ilustrada na **Figura 2** para ácido perfluorooctano sulfônico (PFOS) e perfluorooctano carboxílico, referido como ácido perfluorooctanóico (PFOA), pode ser escrita como:



Onde, “ $C_n F_{2n+1}$ ” define o comprimento da “cauda” do composto perfluoroalquilado, “n” é ≥ 2 e “R” representa a “cabeça” com o grupo funcional anexado. O grupo funcional pode conter 1 ou mais átomos de carbono, que estão incluídos no número total de carbonos ao nomear o composto.

Ácidos Perfluoroalquilados (PFAAs)

Os ácidos perfluoroalquilados (PFAAs) são algumas das substâncias PFAS menos complexas e atualmente são a classe de PFAS mais comumente encontradas no meio ambiente. A degradação biótica e abiótica de muitas substâncias polifluoroalquiladas pode resultar na formação de PFAAs. Como resultado, os PFAAs às vezes são chamados de “PFAS terminais” ou “produtos de degradação final”, o que significa que nenhum outro produto de degradação se formará a partir deles sob condições ambientais normais. As substâncias polifluoroalquiladas (PFAS) que se degradam para criar PFAAs são chamadas de “precursoras”. Os PFAAs são divididos em dois subgrupos principais:

- *Ácidos carboxílicos perfluoroalquilados* (PFCAs), ou carboxilatos perfluoroalquilados, são produtos de degradação finais de certos compostos polifluoroalquilados precursoras, como por exemplo, – fluorotelomeroálcoois (FTOHs). Um exemplo de um composto PFCA é ácido perfluorooctanóico (PFOA).
- *Ácidos perfluoroalquilados sulfônicos* (PFSAs), ou sulfonatos perfluoroalquilados, são também produtos de degradação finais de determinados compostos polifluoroalquilados precursoras, como por exemplo, etil-perfluoro-alquil-sulfonamidas (FASES). Um exemplo de um composto PFSA é ácido perfluorooctano sulfônico (PFOS).

Os PFAAs são a maioria das PFAS tipicamente incluídos nas listas de analitos-alvo de laboratórios comerciais, sendo as principais PFAS para as quais valores de orientação internacionais para o risco a saúde humana têm sido estabelecidos. Como resultado, os PFAAs tendem a direcionar a investigação de áreas de estudo e as decisões quanto à remediação e, desta forma, é útil ter conhecimento das convenções de nomenclatura estabelecidas para esta classe de compostos.

A **Tabela 1** ilustra como essa estrutura de nomenclatura funciona para determinados PFCAs e PFSAs, os quais são chamados, coletivamente, de PFAAs. A tabela completa está incluída no Documento de Orientação.

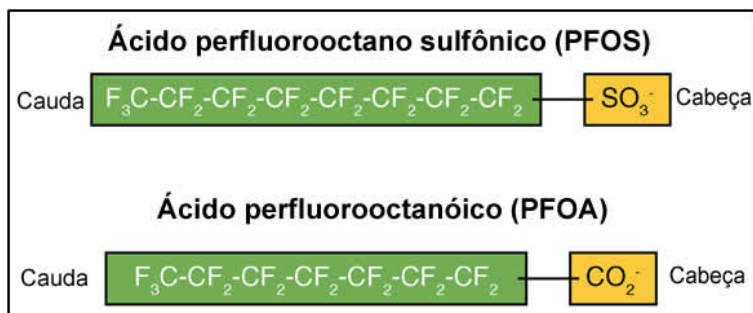


Figura 2. A estrutura de “cabeça” e “cauda” de PFOS e PFOA

Muitas das substâncias PFAA normalmente detectadas são identificadas usando-se a seguinte sigla estrutural:

PFX_Y
onde:

PF = perfluoro

X = comprimento da cadeia de átomos de carbono, usando as mesmas convenções de nomeação que os hidrocarbonetos, baseadas no número de átomos de carbono (*por exemplo, B para butano ou 4 átomos de carbono, Pe para pentano ou 5 átomos de carbono*)

Y = grupo funcional (*por exemplo, A = carboxilato ou ácido carboxílico e S = sulfonato ou ácido sulfônico*)

Tabela 1. Estrutura básica de nomeação e acrônimos de PFAAs selecionados

X	Y	Acrônimo	Nome	Fórmula	Nº CAS
B = buta (4 átomos de carbono)	A = Carboxilato ou ácido carboxílico	PFBA	Perfluorobutanoato	$C_3F_7CO_2^-$	45048-62-2
			Ácido perfluorobutanóico	C_3F_7COOH	375-22-4
	S = Sulfonato ou ácido sulfônico	PFBS	Sulfonato de perfluorobutano	$C_4F_9SO_3^-$	45187-15-3
			Ácido perfluorobutano sulfônico	$C_4F_9SO_3H$	375-73-5
O = octa (8 átomos de carbono)	A = Carboxilato ou ácido carboxílico	PFOA	Perfluorooctanoato	$C_7F_{15}CO_2^-$	45285-51-6
			Ácido perfluorooctanóico	$C_7F_{15}COOH$	335-67-1
	S = Sulfonato ou ácido sulfônico	PFOS	Sulfonato de perfluorooctano	$C_8F_{17}SO_3^-$	45298-90-6
			Ácido perfluorooctano sulfônico	$C_8F_{17}SO_3H$	1763-23-1

Distinção entre Cadeia Longa e Cadeia Curta

Os PFAAs às vezes são descritos como de cadeia longa e de cadeia curta para agrupar PFCAs e PFSAs que podem se comportar de maneira semelhante no meio ambiente. A **Tabela 2** ilustra as diferenças entre os PFCAs e PFSAs de cadeias curta e longa.

Tabela 2. PFCAs e PFSAs de cadeia curta e cadeia longa

Número do Átomos de Carbono	4	5	6	7	8	9	10	11	12
PFCAs	PFCAs de cadeia curta				PFCAs de cadeia longa				
	PFBA	PFPeA	PFHxA	PFHpA	PFOA	PFNA	PFDA	PFUnA	PFDoA
PFSAs	PFBS	PFPeS	PFHxS	PFHpS	PFOS	PFNS	PFDS	PFUnS	PFDoS
	PFSAs de cadeia curta		PFSAs de cadeia longa						

Forma Aniônica x Forma Ácida

Como observado acima, os nomes para as formas aniônica e ácida dos PFAAs são frequentemente usados de forma intercambiável. Entretanto, é fundamental saber qual forma está sendo abordada, devido às diferenças em suas propriedades físicas e químicas e comportamento no ambiente. Listamos abaixo alguns aspectos importantes a serem lembrados em relação às formas aniônica x ácida:

- A maioria dos PFAAs está presente em matrizes ambientais e humanas na sua forma aniônica. Por exemplo, o PFOS está presente no meio ambiente na forma aniônica, ou seja, sulfonato de perfluorooctano;
- Embora os laboratórios possam reportar PFOA ou PFOS usando a forma ácida de seu nome, na verdade estão medindo a forma aniônica (como por exemplo, octanoato ou sulfonato), pois esta é a forma que existe no meio ambiente;
- A forma ácida e seus sais catiônicos associados possuem números CAS, enquanto as formas aniônicas possivelmente não têm. Por exemplo, os PFOS podem existir como sais diferentes (catiônicos), incluindo sódio, lítio, potássio ou amônio. Cada um desses sais terá um número CAS diferente;
- Quando há sal ou ácido na água ou em outros líquidos, ele se dissocia (ou seja, perde seu hidrogênio) e o sal ou ácido se quebra para formar o ânion (por exemplo, COO^-).

Isômeros Lineares e Ramificados de PFAS

Muitas PFAS podem estar presentes como misturas de isômeros lineares e ramificados (ou seja, compostos químicos com a mesma fórmula química, mas estruturas moleculares diferentes), dependendo do processo de fabricação utilizado. Essas diferenças estruturais são importantes, uma vez que podem afetar como os compostos se comportam no meio ambiente. A presença de isômeros lineares e ramificados pode ser útil para entender as fontes de PFAS e a idade da fonte, uma vez que a produção de isômeros varia de acordo com os processos de fabricação. Por exemplo, o processo de fluorotelomerização produz principalmente PFAAs lineares, enquanto a fluoração eletroquímica (ECF) produz uma mistura de isômeros de PFAAs lineares e ramificados. A presença de isômeros lineares e ramificados também pode ter implicações relacionadas ao particionamento, transporte e bioacumulação.

Substâncias Polifluoroalquiladas

Substâncias polifluoroalquiladas e alguns polímeros fluorados de cadeia lateral estão sendo cada vez mais considerados como importantes para entender o fluxo e transporte de PFAS em áreas sob investigação, onde foram lançadas, e no meio ambiente (OCDE 2013; Butt, Muir e Mabury 2014; Liu e Mejia-Avendaño 2013; Wang *et al.* 2011; Mejia-Avendaño *et al.* 2016). A **Figura 1** destaca as substâncias polifluoroalquiladas que, até o momento, foram mais comumente detectadas em áreas com PFAS (Barzen-Hanson *et al.* 2017).

As substâncias polifluoroalquiladas distinguem-se das substâncias perfluoroalquiladas por não serem totalmente fluoradas. Em vez disso, elas têm um átomo que não é flúor (tipicamente hidrogênio ou oxigênio) ligado a pelo menos um átomo de carbono, mas não a todos, enquanto pelo menos dois ou mais dos átomos de carbono remanescentes da cauda de átomos de carbono são totalmente fluorados. A **Figura 3** mostra um exemplo de uma substância polifluoroalquilada na qual dois dos átomos de carbono na cauda não são totalmente fluorados, enquanto os carbonos restantes são. Isso também ilustra a convenção de nomenclatura “n:x” onde “n” é o número de átomos de carbono totalmente fluorados (neste caso, 8) e “x” é o número de átomos de carbono que não são totalmente fluorados (neste caso, 2).

A ligação carbono-hidrogênio (ou outra ligação não fluorada) nas moléculas polifluoroalquiladas cria um ponto “fraco” na cadeia de átomos de carbono que é suscetível à degradação biótica ou abiótica. Como resultado, muitas substâncias polifluoroalquiladas que contêm um grupo perfluoroalquil CF são possíveis compostos precursores, os quais têm o potencial de serem transformados em PFAAs.

Substâncias Fluoroteloméricas

As substâncias fluoroteloméricas são substâncias polifluoroalquiladas produzidas pelo processo de fluorotelomerização. A degradação de substâncias à base de fluorotelômeros é uma fonte potencial de PFCAs no meio ambiente, mas não de PFSAs (Buck *et al.* 2011). As seguintes substâncias fluoroteloméricas são as mais comumente detectadas no ambiente até o momento:

- Álcoois Fluoroteloméricos (FTOHs): Os álcoois fluoroteloméricos n:2 (FTOHs n:2) são matérias-primas essenciais na produção de acrilatos de fluorotelômero n:2 e metacrilatos de fluorotelômero n:2 (Buck *et al.* 2011).
- Ácidos sulfônicos fluoroteloméricos (FTSAs): Os ácidos sulfônicos fluoroteloméricos n:2 (FTSAs n:2) vêm sendo detectados em matrizes ambientais em áreas de estudo onde foram usadas espumas formadora de película aquosa (AFFF), e também em efluentes de estações de tratamento de efluentes e lixiviados provenientes de aterros. FTSAs são compostos precursores e podem sofrer biotransformação aeróbica para formar PFCAs (Buck *et al.* 2011).
- Ácidos carboxílicos fluoroteloméricos (FTCAs): Esses compostos se formam através da biodegradação de FTOHs (Buck *et al.* 2011; Liu e Mejia Avendaño 2013) e vêm sendo detectados em lixiviados provenientes de aterros.

3 PFAS Polímeros

Polímeros são moléculas grandes formadas pela combinação de muitas moléculas menores idênticas (ou monômeros) em um padrão repetitivo. Os polímeros da família PFAS incluem fluoropolímeros, perfluoropoliéteres polímeros (PFPE polímeros) e polímeros fluorados de cadeia lateral. Em geral, acredita-se atualmente que algumas das PFAS polímeros representam riscos menos imediatos ecológicos e à saúde humana em relação a algumas PFAS não polímeros. Como mencionado anteriormente, a maioria dos compostos de interesse encontrados em áreas onde ocorrem liberações ambientais são do tipo “*não polímero*”.

4 Compostos Químicos Alternativos

A preocupação com a persistência, bioacumulação e possíveis efeitos ecológicos e à saúde humana de PFAAs de cadeia longa levou aos fabricantes a desenvolverem substâncias PFAS alternativas de cadeia curta, as quais não devem se degradar em PFAAs de cadeia longa (USEPA 2006a; OECD 2017). As alternativas de cadeia curta incluem, mas não estão limitadas, a produtos à base de fluorotelômero com uma cadeia perfluorohexílica de seis átomos de carbono, e produtos à base de ECF com uma cadeia perfluorobutílica de quatro átomos de carbono. Esses produtos podem se degradar para formar PFAAs de cadeia curta, como PFHxA e PFBS, respectivamente (Wang, Cousins, *et al.* 2013; Buck 2015). Embora uma discussão abrangente sobre os compostos químicos substitutos não seja possível

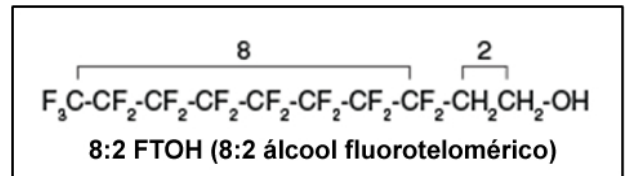


Figura 3. Exemplo de uma substância polifluoroalquilada.

Substâncias Per e Polifluoroalquiladas (PFAS) - Convenções de Nomenclatura *cont.*

nesta ficha informativa, é importante estar ciente dessa tendência de produzir substâncias químicas de cadeia mais curta, pois algumas dessas PFAS podem passar a ser detectadas com mais frequência no meio ambiente. Com a eliminação gradual de certos PFAAs de cadeia longa e seus potenciais precursores (por exemplo, PFOA e 8:2 FTOH) pelos principais fabricantes globais em 2015, as PFAS alternativas vêm sendo introduzidas comercialmente (muitas após revisão pela USEPA) podendo continuar a serem desenvolvidas. Vários estudos sugerem que algumas PFAS alternativas podem ou não ser menos perigosas do que os predecessores de cadeia longa, embora as informações publicamente disponíveis sobre a maioria dos produtos químicos substitutos sejam limitadas (Wang, Cousins, *et al.* 2015; RIVM 2016; OECD 2015b).

5 Referências e Acrônimos

As referências citadas nesta ficha informativa e outras referências podem ser encontradas em <https://pfas-1.itrcweb.org/references/>.

Os acrônimos utilizados nesta ficha informativa e no Documento de Orientação podem ser encontrados em <https://pfas-1.itrcweb.org/acronyms/>.

Traduzido para o português por:

Associação Brasileira das Empresas de Consultoria e Engenharia Ambiental (AESAS)

Fabio Iwashita – New York DEC Fabio.Iwashita@dec.ny.gov

Angus McGrath – Stantec angus.mcgrath@stantec.com



Substâncias Per e Polifluoroalquiladas (PFAS) - Contatos

Sandra Goodrow • New Jersey Department of Environmental Protection
609-940-4164 • Sandra.Goodrow@dep.nj.gov

Kate Emma Schlosser • New Hampshire Department of Environmental Services
603-271-2910 • KateEmma.Schlosser@des.nh.gov

Agosto de 2020



ITRC
1250 H St. NW, Suite 850
Washington, DC 20005
itrcweb.org

