

## 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), como também o *CompTox Chemicals Dashboard* da USEPA (<https://comptox.epa.gov/dashboard/chemical-lists/PFASMASTER>). A definição de PFAS continua evoluindo, refletindo assim o estudo contínuo desses compostos. A Tabela 2-1 no Guia Técnico inclui exemplos de definições de PFAS.

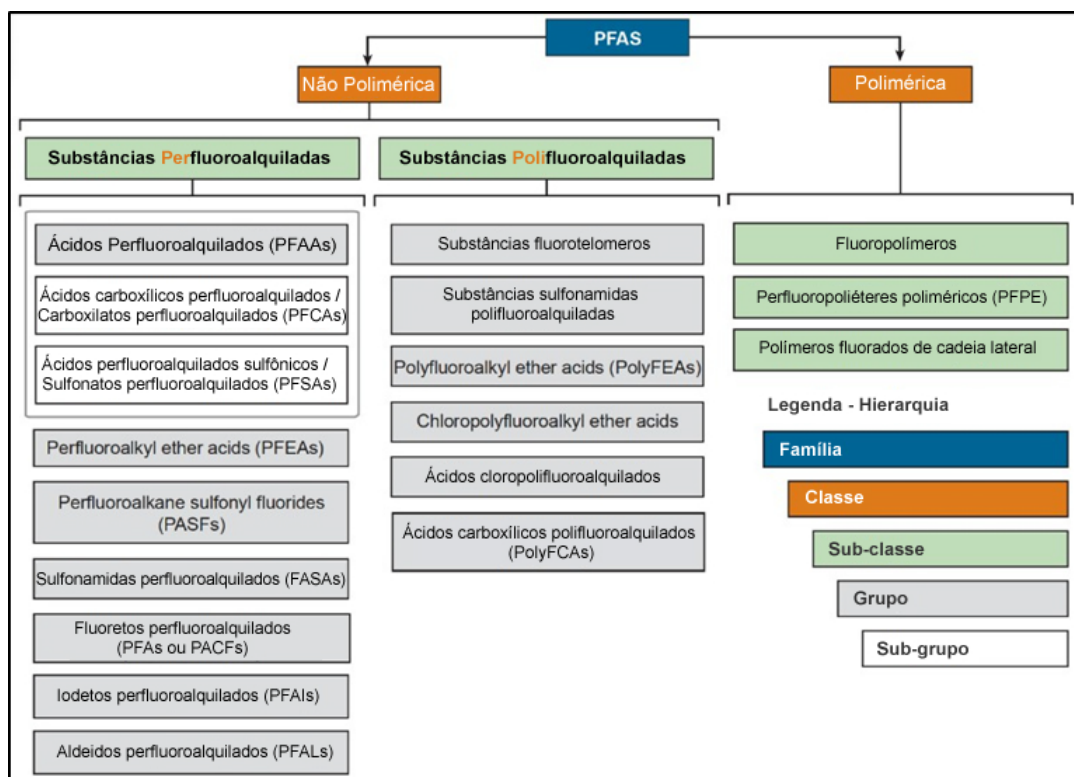
A família de PFAS pode ser dividida em duas classes principais: poliméricas e não poliméricas, conforme mostrado abaixo na **Figura 1**. Futuras atualizações da “árvore genealógica” e da nomenclatura são esperadas devido ao crescente conhecimento público desses compostos.

Esta ficha informativa concentra-se principalmente na classe não polimérica de PFAS mais comumente detectada no meio ambiente. Informações adicionais estão disponíveis na Seção 2.2 do Guia Técnico.

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 (*Guia Técnico*) (<https://pfas-1.itrcweb.org/>).

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

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



**Figura 1. Família de substâncias PFAS**

Fonte: PFAS-1 - Figura 2-4

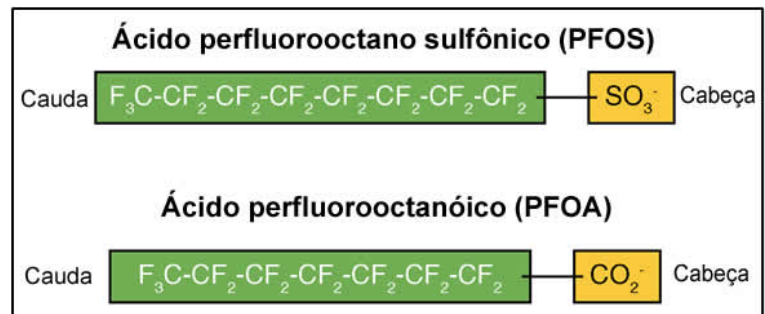
## 2 PFAS Não Poliméricas

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**. As PFAS não poliméricas foram selecionadas no Guia Técnico com enfoque principal devido aos seguintes fatores: (1) estão incluídas na maioria das listas de análise de PFAS dos laboratórios; (2) são as PFAS mais comumente detectadas (até o momento) em humanos, biota e outros meios ambientes; (3) aparentemente são relativamente mais abundantes em *sites* de investigação de PFAS; (4) podem ter dados disponíveis sobre os potenciais efeitos ecológicos e à saúde humana decorrentes da exposição ambiental; e/ou (5) valores orientadores estaduais ou federais podem existir ou estar em desenvolvimento, no caso de algumas PFAS.

Esses compostos foram selecionados como principal enfoque do Guia Técnico, uma vez que: (1) são os mais comumente detectados (até o momento) em humanos, na biota e outros meios ambientais; (2) parecem ser relativamente mais abundantes nos *sites* de investigação de PFAS; (3) possuem mais dados disponíveis sobre os potenciais efeitos ecológicos e à saúde humana decorrentes da exposição ambiental; (4) já podem ter valores de orientação estaduais ou federais; e/ou (5) estão incluídos na maioria das listas laboratoriais de analitos 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 das 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:



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

### $C_n F_{2n+1}-R$

Onde, “ $C_n F_{2n+1}$ ” define o comprimento da “cauda” do composto perfluoroalquilado, “n” é  $\geq 2$  e “R” representa a “cabeça” do 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 (PFAA)

Os ácidos perfluoroalquilados (PFAA) são algumas das PFAS menos complexas e atualmente são a classe de PFAS mais comumente analisada no meio ambiente. A degradação biótica e abiótica de muitas substâncias polifluoroalquiladas pode resultar na formação de PFAA. Como resultado, os PFAA às vezes são chamados de “PFAS terminais” ou “produtos finais de degradação”, 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 PFAA são chamadas de “precursoras”. Os PFAA são divididos em dois subgrupos principais:

- *Ácidos carboxílicos perfluoroalquilados* (PFCA), ou carboxilatos perfluoroalquilados, são produtos finais de degradação de certos compostos polifluoroalquilados precursoras, como por exemplo, – fluorotelomeroálcoois (FTOH). Um exemplo de um composto PFCA é ácido perfluorooctanóico (PFOA).
- *Ácidos perfluoroalquilados sulfônicos* (PFSA), ou sulfonatos perfluoroalquilados, são também produtos finais de degradação 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 PFAA 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 baseados na saúde federais ou estaduais têm sido estabelecidos. Como resultado, as PFAA tendem a direcionar a investigação de *sites* 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 PFCA e PFSA, os quais são chamados, coletivamente, de PFAA. A tabela completa está incluída no Guia Técnico.

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

**PFX<sub>Y</sub>**

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 PFAA selecionados**

X	Y	Acrônimo	Nome	Fórmula	Nº CAS
B = buta (4 átomos de carbono)	A = Carboxilato ou ácido carboxílico	PFBA	Perfluorobutanoato	C <sub>3</sub> F <sub>7</sub> CO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	45048-62-2
			Ácido perfluorobutanóico	C <sub>3</sub> F <sub>7</sub> COOH	375-22-4
	S = Sulfonato ou ácido sulfônico	PFBS	Sulfonato de perfluorobutano	C <sub>4</sub> F <sub>9</sub> SO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	45187-15-3
			Ácido perfluorobutano sulfônico	C <sub>4</sub> F <sub>9</sub> SO <sub>3</sub> H	375-73-5
O = octa (8 átomos de carbono)	A = Carboxilato ou ácido carboxílico	PFOA	Perfluorooctanoato	C <sub>7</sub> F <sub>15</sub> CO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	45285-51-6
			Ácido perfluorooctanóico	C <sub>7</sub> F <sub>15</sub> COOH	335-67-1
	S = Sulfonato ou ácido sulfônico	PFOS	Sulfonato de perfluorooctano	C <sub>8</sub> F <sub>17</sub> SO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	45298-90-6
			Ácido perfluorooctano sulfônico	C <sub>8</sub> F <sub>17</sub> SO <sub>3</sub> H	1763-23-1

## Distinção entre Cadeia Longa e Cadeia Curta

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

**Tabela 2. PFCA e PFSA de cadeia curta e cadeia longa**

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

## Forma Aniônica x Forma Ácida

Como observado acima, os nomes para as formas aniônica e ácida dos PFAA 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 PFAA 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, perfluorooctanato ou perfluorooctano sulfônico), 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 os possuem. 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<sup>-</sup>).

### 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 PFAA lineares, enquanto a floração eletroquímica (ECF) produz uma mistura de isômeros de PFAA 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 identificados como importantes para entender o destino e transporte de PFAS nos *sites*, onde são liberados, 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 *sites* com PFAS (Barzen-Hanson et al. 2017; OECD 2018).

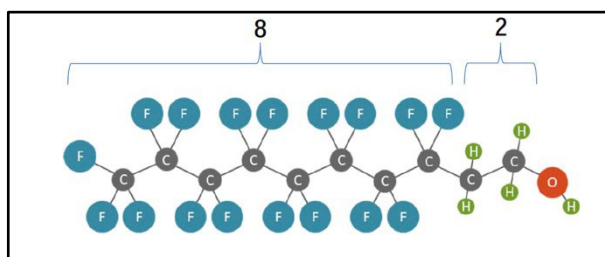
As substâncias polifluoroalquiladas distinguem-se das substâncias perfluoroalquiladas por não serem totalmente fluoradas. Em vez disso, elas têm um átomo que não é flúor (tipicamente hidrogênio ou oxigênio) ligado a pelo menos um átomo de carbono, mas não a todos, enquanto que, pelo menos dois ou mais 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 de 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 PFAA.

### Substâncias Fluoroteloméricas

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

- Álcoois Fluoroteloméricos (FTOH): Os álcoois fluoroteloméricos n:2 (FTOH n:2) são matérias-primas essenciais na produção de acrilatos de fluorotelômero n:2 e metacrilatos de fluorotelômero n:2 (Buck et al. 2011).



**Figura 3. Exemplo de uma substância polifluoroalquilada**

Fonte: M. Olson, *Trihydro*. Usado com permissão. PFAS-1, [Figura 2-12](#).

- Ácidos sulfônicos fluoroteloméricos (FTSA): Os ácidos sulfônicos fluoroteloméricos n:2 (FTSA n:2) vêm sendo detectados em matrizes ambientais em *sites* onde foi usada espuma formadora de película aquosa (AFFF), e em efluentes de estações de tratamento de efluentes e lixiviados provenientes de aterros. FTSA são compostos precursores e podem sofrer biotransformação aeróbica para formar PFCAs (Buck et al. 2011).
- Ácidos carboxílicos fluoroteloméricos (FTCA): 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 Poliméricas

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

### 5 Referências e Acrônimos

As referências citadas nesta ficha informativa e em outros documentos podem ser encontradas em <https://pfas-1.itrcweb.org/references/>. Números de referência são incluídos nesta ficha informativa para citações não exclusivas na lista de referência do Guia Técnico.

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



### Substâncias Per e Polifluoroalquiladas (PFAS) - Contatos

**Sandra Goodrow** • New Jersey Department of Environmental Protection  
609-940-4164 • [Sandra.Goodrow@dep.nj.gov](mailto:Sandra.Goodrow@dep.nj.gov)

**Kristi Herzer** • Vermont Department of Environmental Conservation  
802-461-6918 • [Kristi.Herzer@vermont.gov](mailto:Kristi.Herzer@vermont.gov)

Setembro de 2023