

Metrologia Química

Este ano ímpar para a ABQ e a RQI terá neste número um desfecho que não poderia ser melhor. A matéria de capa trata de um assunto da maior relevância hoje: Metrologia Química. Embora sua importância seja indiscutível no mundo moderno, este assunto ainda é pouco conhecido ou até mesmo desconhecido de grande parcela dos profissionais da química. Então, a RQI se propôs a preencher esta lacuna convidando especialistas na área para expor a seus leitores este tema em seus pormenores. Do INMETRO (Instituto Nacional de Metrologia), Vanderléa de Souza (engenheira química formada pela Universidade Federal Fluminense, pós-

doutora pela UNICAMP e pelo NIST (National Institute of Standards and Technology - EUA), atualmente assessora na Diretoria de Metrologia Científica e Industrial do INMETRO) nos fala não só da metrologia química, mas também do papel do INMETRO em nível nacional. Em seguida, o Prof. Roy Edward Bruns (Professor Titular do Instituto de Química da UNICAMP, detentor da Grã-Cruz da Ordem Nacional do Mérito Científico, pesquisador 1A do CNPq) dedica especial atenção a uma ferramenta moderna e versátil para o profissional da química: a quimiometria, tema que abordou em uma das palestras do 52º CBQ.

Entrevistando Vanderléa de Souza

RQI: O que se entende por metrologia química?

Vanderléa: Medições químicas são efetuadas, praticamente, em todos os ramos da atividade humana. Coloquemos algumas das principais ações do nosso dia a dia: a água que bebemos, os medicamentos que tomamos, os alimentos que comemos, o ar que respiramos. Podemos ampliar isso para exames clínicos (de sangue ou urina que fazemos rotineiramente). Somente nos preocupamos com a qualidade de alguns desses produtos quando é identificado algum problema. É aí que entra a metrologia. Por definição, Metrologia é a ciência das medições e, por analogia, a metrologia química é a ciência das medições químicas. A metrologia química atua na qualidade e na confiabilidade dos resultados das medições químicas, através de várias ferramentas, a principal delas é o desenvolvimento de padrões/referências, que em química são chamados de materiais de referência. Além dos materiais de referência, tem-se o desenvolvimento de métodos ou procedimentos de referência, a organização de ensaios de proficiência, para avaliar como os laboratórios estão medindo, a capacitação de profissionais, dentre outras ferramentas, para que possamos ter certeza que a água que bebemos, os alimentos comemos e o ar que respiramos não estão contaminados e que os medicamentos tem a composição e concentração descritas em sua bula.

A metrologia química foi instituída no mundo oficialmente a partir da criação do Comitê Consultivo de Quantidade de Matéria (CCQM) em 1993, no âmbito do Bureau Internacional de Pesos e Medidas, que é o órgão

máximo da metrologia no mundo e fica na França, assim como todos os outros comitês. A criação do CCQM foi uma iniciativa dos Institutos de Metrologia da Inglaterra (LGC) e dos Estados Unidos (NIST), que identificaram problemas na medição da qualidade da água de rios e a falta de harmonização dos resultados medidos pelos diversos laboratórios de seus países. A Divisão de Metrologia Química (Dquim) foi criada no Inmetro em 2000, dentro da Diretoria de Metrologia Científica e Industrial (Dimci), da qual fui responsável por sua implantação e chefe por 8 anos. Hoje atuo na Assessoria Científica da Diretoria. A Dquim atua principalmente no desenvolvimento de Materiais de Referência nas várias áreas da química (orgânica, inorgânica, gases, biocombustíveis, eletroquímica), no desenvolvimento de métodos/procedimentos de referência, na organização de ensaios de proficiência, na participação em comparações interlaboratoriais com outros institutos de metrologia para garantir a equivalência dos nossos padrões e na capacitação de profissionais. O Inmetro também atua nas áreas de biotecnologia e nanometrologia.

RQI: Qual é o papel do INMETRO na área de metrologia no Brasil?

Vanderléa: O papel do Inmetro é prover confiança à sociedade brasileira nas medições e nos produtos, através da metrologia e da avaliação da conformidade, promovendo a harmonização das relações de consumo, a inovação e a competitividade do País. As atividades estão centradas nas ferramentas técnicas básicas para prover

Vanderléa de Souza



Foto: arquivo pessoal

confiança em toda a cadeia produtiva – da matéria prima ao consumidor final, seja no mercado interno seja nos mercados externos disputados pelos produtos brasileiros.

O Inmetro mudou muito, antes, suas atividades eram quase totalmente voltadas para serviços de calibração, com profissionais de nível médio e graduados. Hoje a instituição tem uma diversificada gama de atividades está assentada em conhecimento científico e tecnológico, baseado em pesquisa e intercâmbio internacional, desenvolvimento tecnológico e inovação e conta com técnicos de nível médio, graduados, mestres e com mais de 200 doutores. Um modelo de atuação alinhado com seus congêneres nos principais países industrializados, onde os institutos nacionais de metrologia são alavancas fundamentais para o desenvolvimento econômico e social. Esta mudança foi evidenciada na lei 12.545 que foi publicada em 14 de dezembro de 2011, e que muda o nome da instituição, agora é Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia. Todas estas novas atividades estão contempladas na lei, que ampliou bastante as atividades do Inmetro, inclusive podendo conceder bolsas de pesquisa científica e tecnológica diretamente sem a necessidade do intermédio de órgãos de fomento. Além disso, poderá anuir nos processo de importação de produtos por ele regulamentados e ser solicitado pela Secretaria da Receita Federal com vistas à verificação no despacho aduaneiro de importação, do cumprimento dos regulamentos técnicos emitidos pelo Conmetro e pelo Inmetro.

RQI: Qual a importância da metrologia química na formação dos profissionais dessa área?

Vanderléa: Questões que envolvem o controle de qualidade e/ou confiabilidade dos resultados de medição na área de química pouco são abordadas nos cursos de nível médio, de nível superior, sendo que um pouco mais é abordado na disciplina de Química Analítica na pós-graduação, normalmente através da estatística. Por isso, o mercado é carente de profissionais com esta visão/formação. Hoje, com a globalização, as medições químicas exercem um importante papel na sociedade moderna, sendo a base científica fundamental para a tomada de decisões quanto à qualidade dos produtos abrangendo diversas áreas, desde alimentos, saúde, energia, forense, farmacêutica, meio-ambiente, dentre outras.

Atualmente, os países desenvolvidos “pesam e medem” a um custo equivalente a aproximadamente 5% do PIB, mais concretamente, segundo o Relatório do “European Measurement Project”, o valor correspondente aos 5% do PIB em atividade de “Pesar e Medir”, nos países desenvolvidos, equivaleria aproximadamente a 425 bilhões de euros. Segundo o mesmo relatório, para cada euro dedicado às atividades de medição são gerados 3 euros de benefícios diretos – relação custo-benefício 1:3. Em um estudo efetuado pelo Instituto de Metrologia americano, NIST, em que os benefícios indiretos foram também estimados, esta relação oscila entre 3 e 111, conforme as áreas, sendo o valor mais elevado na área de Química. Ou seja, medir e medir bem dá lucro, mas medir mal e o retrabalho somente traz prejuízos. No que tange ao Brasil, existe a necessidade de um aumento imediato na confiabilidade dos resultados das medições químicas, já que o nosso país se projeta como um dos mais importantes protagonistas do comércio mundial.

O Inmetro já atua na formação de profissionais do ensino médio, com o apoio do Governo do Estado do Rio de Janeiro, na parceria com o Colégio Estadual Círculo Operário de Xerém, que possui o curso técnico de Metrologia, onde os alunos têm aula de metrologia (mecânica, acústica, elétrica, química, materiais, térmica e óptica) nas instalações do Inmetro e também fazem estágio. Também foram incluídas as novas áreas de biotecnologia e nanotecnologia. Em nível de graduação, foi um marco a criação de um pólo da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ) em Xerém, nas áreas de Biotecnologia e Bioinformática. Já está sendo ministrada a disciplina de Metrologia como eletiva para curso de Engenharia. A resolução aprovada em 2008 pelo conselho universitário da UFRJ veio celebrar o convênio entre a Universidade, a Prefeitura de Caxias e o Inmetro. O Inmetro também possui o Mestrado Profissional em

Metrologia e Qualidade e fui responsável pela elaboração de um projeto para formação de recursos humanos em metrologia química, para capacitarmos professores para ministrá-la.

É importante ampliar esta capacitação de profissionais em metrologia química, tanto a nível médio quanto em nível de graduação/pós-graduação, mas para isso é necessário que tenhamos um número razoável de instrutores/professores para fazê-lo, daí a importância do projeto.

RQI: Como situa o Brasil em termos de avanços na área de metrologia em relação ao mundo?

Vanderléa: Conforme já comentei na primeira pergunta, o BIPM tem comitês consultivos que tem caráter técnico, para cada área da metrologia, o de metrologia térmica foi criado em 1937, o de metrologia elétrica em 1927 e assim foi até o de metrologia química, que foi recentemente criado em 1993. Estes Comitês organizam comparações interlaboratoriais para verificar a equivalência entre as medições e entre os padrões dos institutos de metrologia do mundo. Quem coordena cada uma destas comparações é o instituto mais experiente naquela

propriedade de referência/analito. Os métodos de referência possuem as mais altas qualidades metrológicas e por isso são chamados métodos primários, que só existem em institutos nacionais de metrologia. O sistema de medição de pH foi implantado no Inmetro em junho de 2003 e é o único da América do Sul, assim como outros métodos primários. Nossa equivalência/competência é reconhecida através destas comparações quando nosso resultado é equivalente ao do coordenador da comparação. Um destaque especial está na parceria que foi estabelecida entre o Inmetro e o NIST para o desenvolvimento de materiais de referência certificados para biocombustíveis. Isto significa definir padrões, que até então não existiam para essa área estratégica e com um instituto de grande experiência e competência (o NIST foi criado em 1901). Recentemente, coordenamos uma comparação de teor de água e etanol em álcool combustível, o que nos fornece um caráter de “experiente” nesta área. Nas outras áreas da metrologia, elétrica, mecânica, térmica, ou seja, a metrologia “física”, o Brasil já está bem estabelecido. Agora, estamos atuando em busca da equivalência dos nossos padrões para as novas áreas como biotecnologia e nanotecnologia.

Entrevistando Roy Edward Bruns

RQI: O que o Sr. entende por metrologia química?

Bruns: Metrologia química é a quantificação de incerteza em medidas químicas, principalmente as quantidades de substâncias presentes em amostras. Além de caracterizar todos as fontes de incerteza numa medição química a metrologia química tem um grande papel no desenvolvimento de materiais de referência.

RQI: O que é quimiometria?

Bruns: Quimiometria é o uso de métodos matemáticos e estatísticos para obter resultados mais confiáveis fazendo um número mínimo de experiências e para extrair a máxima de informação útil de dados químicos.

RQI: Porque as ferramentas quimiométricas são tão importantes na pesquisa e no desenvolvimento de novos processos químicos e procedimentos analíticos?

Bruns: Métodos quimiométricos englobam uma visão multivariada de sistemas, processos e produtos químicos. A palavra chave aqui é multivariada. Se tiver um processo que depende dos níveis ou valores de dois fatores, por exemplo, o rendimento de uma reação que depende do tempo e da temperatura, os níveis destes fatores são variados simultaneamente. Em lugar de variar primeiro a

temperatura e após o tempo para otimizar o rendimento, você utiliza um planejamento ou delineamento de experimentos na qual os níveis destes dois fatores estão variadas simultaneamente numa maneira sistemática.

Para procedimentos analíticos a quimiometria utiliza muitos sinais analíticos simultaneamente. Por exemplo, em lugar de usar a intensidade de um



Foto: Fabio Pereira

comprimento de onda e a lei de Beer para fazer uma análise quantitativa com dados espectrais os métodos quimiométricos utilizam as intensidades em todos os comprimentos de onda, ou seja, utiliza o espectro inteiro.

Claro isto somente é factível devido a saída numérica de instrumentos modernos e microcomputadores.

RQI: Como a formação dos profissionais da área química é beneficiada pela quimiometria?

Bruns: Além de ter capacidade de explorar métodos quimiométricos para resolver problemas que não podem ser resolvidos sem uma visão multivariada o químico ou engenheiro ganha um conhecimento sólido de estatística básica que permite uma atuação mais completa como profissional.

RQI: A literatura brasileira é rica em referências sobre metrologia química e quimiometria? O Brasil publica muitos trabalhos nesses campos?

Bruns: Existem muitos trabalhos publicados na literatura científica usando quimiometria. Estes trabalhos abordam problemas em planejamento de experimentos, classificação usando técnicas multivariadas e calibração multivariada. Há uns anos atrás, usando “*factorial design*” e “*response surface analysis*”, verifiquei que Brasil tinha produzido cerca de 2% de trabalhos da produção mundial no base de ISI (Institute for Scientific Information) com estas palavras chaves.

RQI: Qual é sua visão para o futuro?

Bruns: Não tenho dúvida que a importância de quimiometria vai crescer cada vez mais, especialmente dentro da área de química analítica. Com desenvolvimento de microcomputadores cada vez mais potentes vamos ver o desenvolvimento de novas metodologias quimiométricas. Mas a utilização de

métodos de matemática e estatística multivariada não é restrita somente as áreas de química e engenharia química. Uma das aplicações mais bonitas, na minha opinião, foi a descoberta de um buraco negro fora do centro de uma galáxia vizinha usando imagens e um análise de componentes principais por físicos da Universidade de São Paulo. Certamente a utilização de imagens e, porque não, sequências de imagens (filmes) vai crescer muito nos próximos anos.

RQI: Que contribuições o senhor julga que deu à quimiometria no Brasil?

Bruns: Comecei a estudar quimiometria em 1977, três anos depois que esta palavra foi criada. Inicialmente, introduzimos a utilização do método de componentes principais para tratar dados químicos no Brasil. Nos anos 80 concentramos nossos esforços em planejamento estatístico de experimentos. O trabalho que me deu mais prazer e satisfação, e que eu considero minha contribuição maior em quimiometria, foi a publicação do livro “Como fazer experimentos” com o Prof. Benício de Barros Neto e a Profa. Ieda Spacino Scarminio, que já vendeu mais de 12 mil exemplares. Mas a quimiometria contribuiu muito para a melhoria na qualidade de minha pesquisa em espectroscopia vibracional e estruturas eletrônicas de moléculas. Em resumo, se eu contribuí para o desenvolvimento de quimiometria no Brasil, a quimiometria contribuiu muito mais em retorno para minha pesquisa.

Notas do Editor:

Para maiores informações, pode-se enviar e-mail para os endereços eletrônicos vsouza@inmetro.gov.br e bruns@iqm.unicamp.br.

Para conhecer o trabalho desenvolvido pelo INMETRO, acesse o portal www.inmetro.gov.br.



Foto: arquivo INMETRO

Os Laboratórios de Análise Inorgânica, Análise Orgânica, Análise de Gases e Eletroquímica da Dquim estão localizados no prédio 04 que aparece ao centro desta vista aérea do complexo de Xerem, RJ