

Agentes Químicos e Propriedades Físico-Químicas

- ✓ Agentes Químicos – Substâncias e Misturas
 - ✓ Classificações Gerais
 - ✓ Gases vs Vapores
 - ✓ Estados de Agregação
 - ✓ Propriedades Físico-Químicas Gerais
-

Agentes Químicos

Por que conhecer?

- No mínimo, 200 milhões de substâncias químicas e misturas no mundo, de acordo com o CAS. Esse número está em constante crescimento, à medida que novos produtos são desenvolvidos.
- Presença constante e diversificada no nosso cotidiano.
- A depender das condições e circunstâncias, podem ser caracterizados com potencial de causar dano (perigoso) ou ser considerado essencial (inofensivo).

Agentes Químicos

O que é CAS ?

- O **número CAS** ou registro **CAS** (**CAS** number ou **CAS** registry number, em inglês) de um composto químico, polímero, sequência biológica e liga.
- É um **número** com um registro único no banco de dados do **Chemical Abstracts Service**, uma divisão da **Chemical American Society**.
- Os números de registro do CAS podem conter mais de nove dígitos, divididos por hífen em três partes, sendo o último dígito o verificador.

Agentes Químicos

Cada substância recebe um **número de registro único**, o que é muito útil, já que uma mesma substância pode ter vários nomes diferentes. O percloroetileno, por exemplo, também é chamado de tetracloroetano, tetracloroetileno e percloroetano. Seu **CAS**, porém, é o 127-18-4

3. COMPOSIÇÃO E INFORMAÇÕES SOBRE OS INGREDIENTES

Este produto é uma substância.

Componente	CAS	Quantidade
Percloroetileno	127-18-4	> 99,9 %

Sinônimo: Tetracloroetileno.

Exemplos de CAS !

Os números são atribuídos cronologicamente e não têm significação particular.

Produto

Número CAS

Formaldeyde

?

?

[64-17-5]

?

[16731-55-8]

?

[7757-82-6]

?

[103-90-2]

Agentes Químicos- O que número ONU e número de Risco ?

O número ONU é um número de série determinado pela Organização das Nações Unidas (ONU) para identificar produtos químicos e/ou que oferecem perigo à vida.

Ele é composto por quatro dígitos e fica na parte de baixo do painel laranja (o painel de segurança).

É como se fosse o RG de um produto perigoso. Acima de 5 kg, já é obrigatório o uso de número ONU para produtos dessa natureza.

Agentes Químicos- O que é número de Risco ?

O número de risco é muito usado na Europa para identificar [cargas perigosas](#), mas também é exigido em alguns países da América do Sul. Essa numeração fica localizada na parte de cima do painel laranja, que é colocado em contentores para granel intermodais.

Esse número é formado, na maioria das vezes, por dois ou três dígitos, que indicam diferentes tipos de riscos. Entre eles, podemos destacar:

- emissão de gás devido a reação química ou pressão;
- inflamabilidade de líquidos e gases (ou de líquidos suscetíveis de autoaquecimento);
- inflamabilidade de sólidos (ou de sólidos suscetíveis de autoaquecimento);
- efeito oxidante (ou seja, que facilita incêndios);
- toxicidade;
- radioatividade;
- corrosividade;
- reação violenta espontânea (como explosões e desintegrações).

Agentes Químicos- O que número ONU e número de Risco ?

Trata-se de um número composto por quatro algarismo, que deve ser fixado na parte inferior do Painel de Segurança, servindo para a identificação de uma determinada substância ou produto classificado como perigoso.

O **número ONU** e o **número de risco** são números vistos normalmente em estradas em caminhões que transportam produtos perigosos. Esses números nos dizem qual produto está sendo transportado e qual risco que esse produto pode nos oferecer.



33

Número de Risco: Líquido Muito Inflamável – Pfg (<23oC)



1203

Número ONU para GASOLINA

Esquema de placa com o número de risco (acima) e o número ONU (abaixo)

Agentes Químicos- Número de Risco e número ONU

Número de Risco - É o número que indica a natureza e a intensidade do **risco** do produto perigoso e aparece na parte superior do painel de segurança.

Número ONU – Número de quatro algarismos na parte inferior do painel de segurança. É um número de série determinado pela Organização das Nações Unidas (ONU) para identificar produtos químicos e/ou que oferecem perigo à vida.



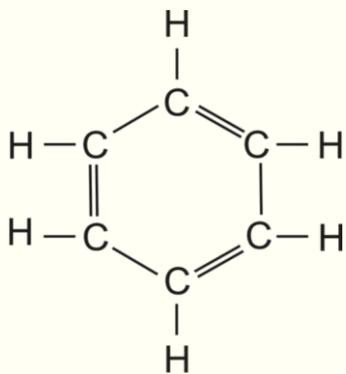
Classificação de Agentes Químicos

- ✓ Permitir rápida identificação e caracterização dos agentes agrupados nas diferentes classes.
- ✓ Auxiliar a prevenir os efeitos nocivos adversos que possam causar, ou nortear as ações e medidas caso ocorra alguma exposição nociva.

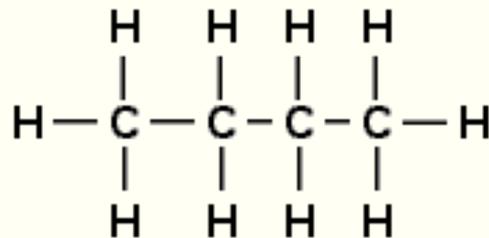


Estruturas Químicas

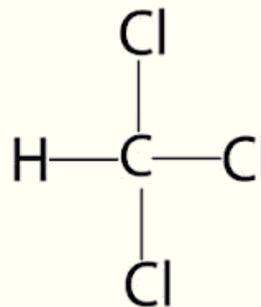
- Orgânicos:** contêm átomos de carbono e, normalmente, de hidrogênio na sua estrutura.



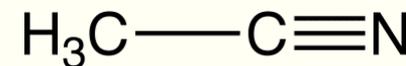
Benzeno



Butano



Clorofórmio



Acetonitrila

Estruturas Químicas

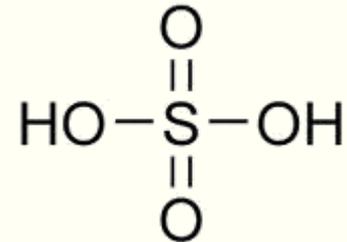
- **Inorgânicos:** em geral, não contêm átomos de carbono como principal característica. Ácidos, bases, sais, óxidos, metais.



Soda cáustica



Sal de cozinha



Ácido sulfúrico

Ag, Pb, Fe

Metais

CaO

Cal

* Alguns podem ser reativos com água

Oxidantes

- Causam ou contribuem para combustão de outro material, normalmente fornecendo oxigênio.

- *Peróxidos (água oxigenada - H_2O_2); ácido nítrico (HNO_3)*



Peróxido de sódio (Na-O-O-Na) + Zinco



Peróxidos Orgânicos



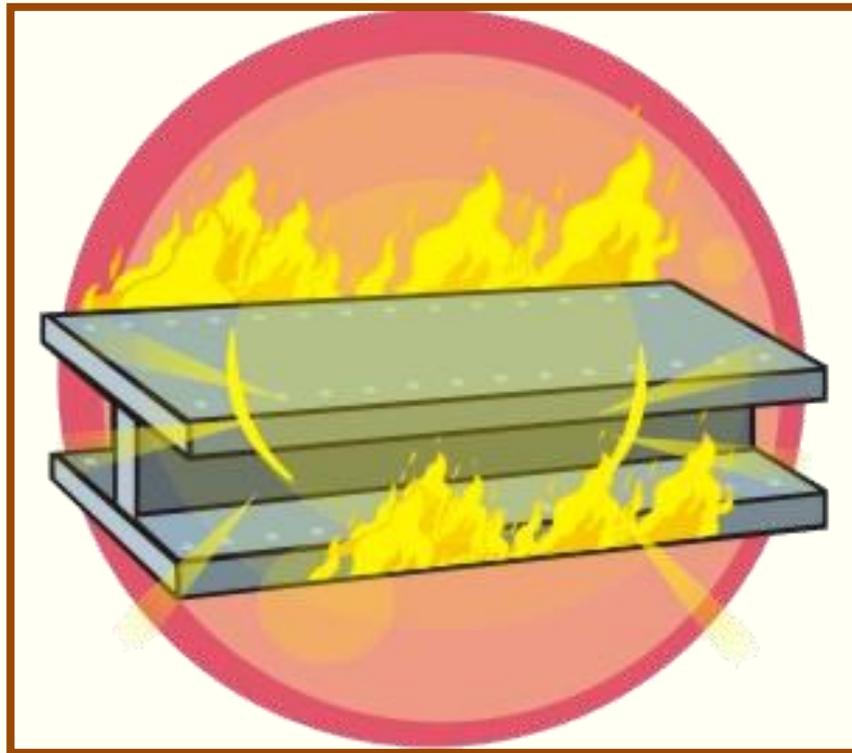
- Líquidos ou sólidos orgânicos que contêm -O-O- em sua estrutura.
- Termicamente instáveis; podem sofrer decomposição exotérmica auto-acelerada. Têm uma ou mais das seguintes características:
 - *Sujeitos a decomposição explosiva*
 - *queimam rapidamente*
 - *Sensíveis a impactos ou fricções*
 - *Reagem perigosamente com outras substâncias.*

Exemplos

Peracetato de t-butila, Peróxido de acetilacetona, Peróxido de benzoíla

Pirofóricos

- Sólidos ou líquidos que, mesmo em pequenas quantidades, são capazes de se inflamar após um contato de cinco minutos com o ar.



Magnésio, titânio, urânio - (pó finamente dividido)

Explosivos

- Sólidos ou líquidos que, por si só e por reação química, podem desprender gases a T, P e v tais que podem ocasionar danos a seu entorno.



Nitrato de Amônio (de Fertilizante a EXPLOSIVO NH_4NO_3)

Corrosivos

- Podem provocar lesões na pele; olhos e mucosas, destruição de tecidos ou queimaduras. Podem atacar a madeira, metais e plásticos.
 - *Produtos de limpeza, ácidos fortes ou álcalis, soda cáustica.*



Líquidos Inflamáveis

- **Líquidos Inflamáveis: Com Ponto de Fulgor de até 93°C.**



Gases Inflamáveis

- **Gases Inflamáveis:** a 20°C e na pressão padrão de $101,3\text{kPa}$ possuem alguma capacidade de se inflamar quando misturados com o ar e com uma fonte de calor.



Hidrogênio, metano, butano, etc.

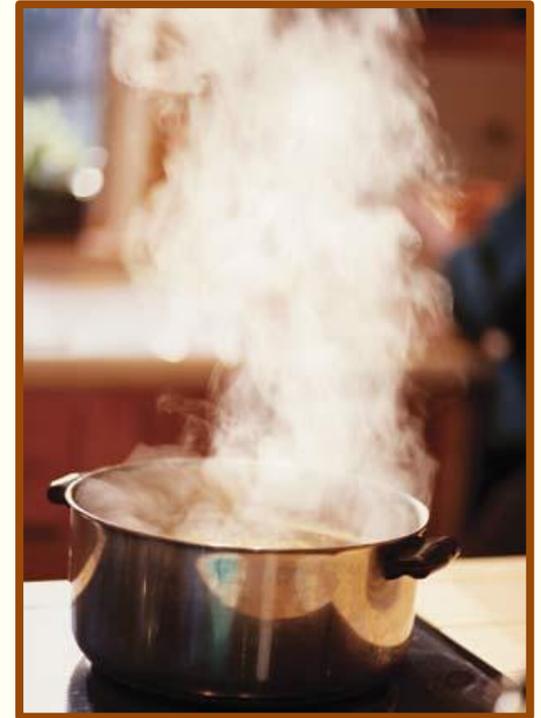
Sólidos Inflamáveis

- **Sólidos inflamáveis:** Substâncias em pó, granulares ou pastosas facilmente combustíveis. Propagam as chamas. Por atrito, podem provocar ou contribuir para o fogo.



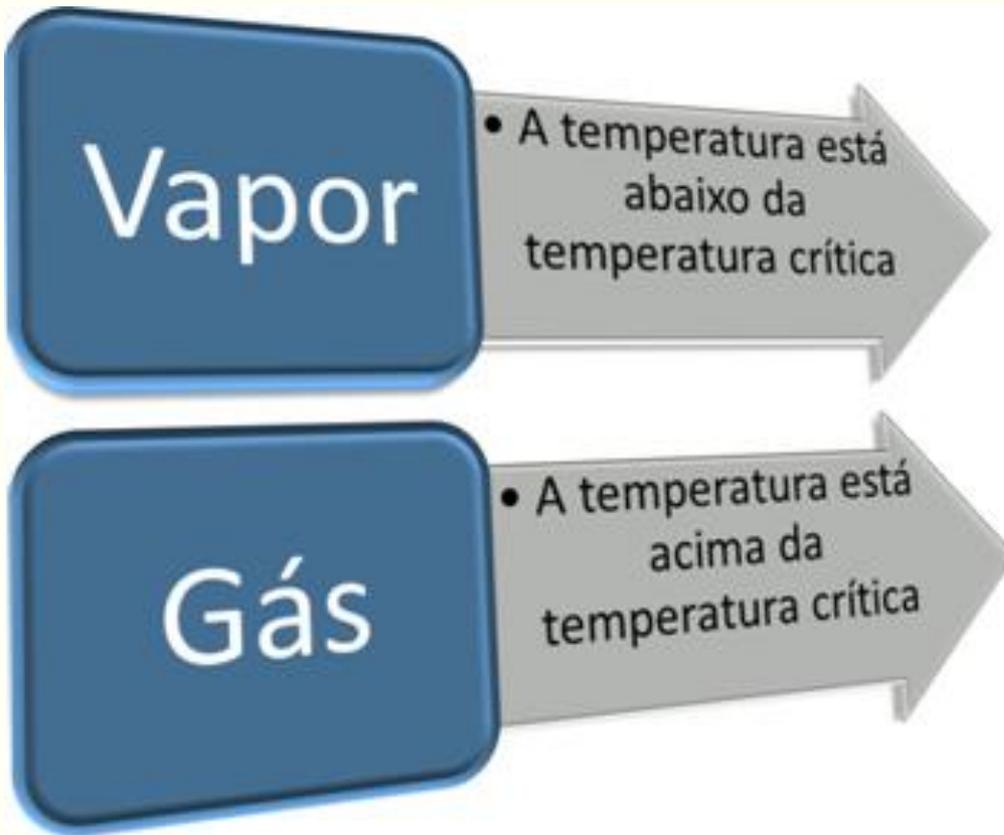
- ***Emissão de gases inflamáveis em contato com água:*** líquidos ou sólidos que após interação com água podem se tornar espontaneamente inflamáveis ou gerar gases inflamáveis (carbeto de cálcio – CaC_2 ; hidretos metálicos).
- ***Auto-reativos:*** líquidos ou sólidos não explosivos; oxidantes ou peróxidos orgânicos que são instáveis ou sujeitos a decomposição exotérmica, mesmo sem oxigênio (azidas; azo-compostos; etc).
- ***Auto-aquecíveis:*** líquidos ou sólidos não pirofóricos que em contato com o ar e sem fornecimento de energia estão sujeitos a auto-aquecer. Reação gradual com O_2 (oxidação), pode levar a auto-ignição ou combustão (alguns óleos minerais, como óleo de linhaça).

Gás x vapor



Gás x Vapor

O **vapor** é a matéria no estado gasoso quando é capaz de existir em equilíbrio com o estado líquido ou sólido, e o **gás** é o estado fluido da matéria.



Temperatura crítica é a temperatura acima da qual a substância só pode existir na forma de **gás**, pois é impossível mudar seu estado gasoso para o líquido apenas com o aumento da pressão.

Estados de Agregação

- **Aerodispersóides:** dispersão de partículas sólidas ou líquidas, de tamanho reduzido, no ar. Podem manter-se em suspensão por um longo período de tempo. **0,001 – 100 μm**
- Classificação por forma, tamanho, origem e modo como a partícula é formada.
- Auxilia a prever o risco envolvido na exposição a um agente químico em particular.
 - *Exemplo: tamanho das partículas é significativo na exposição por inalação ou aspiração.*

Estados de Agregação

- **Poeiras:** partículas sólidas dispersas no ar, obtidas por ruptura mecânica de sólidos. *Madeira, amianto, granito.*



Estados de Agregação

- **Fumos:** partículas sólidas obtidas pela condensação/oxidação de vapores de substâncias sólidas à temperatura ambiente. *Soldagem, PbO, Fe₂O₃.*



Estados de Agregação

- **Névoas:** partículas líquidas obtidas pela ruptura mecânica de líquidos. *Aplicação de pesticidas líquidos, pinturas em spray.*



Estados de agregação

- **Neblinas:** partículas líquidas obtidas pela condensação de vapores de substâncias líquidas à temperatura ambiente.



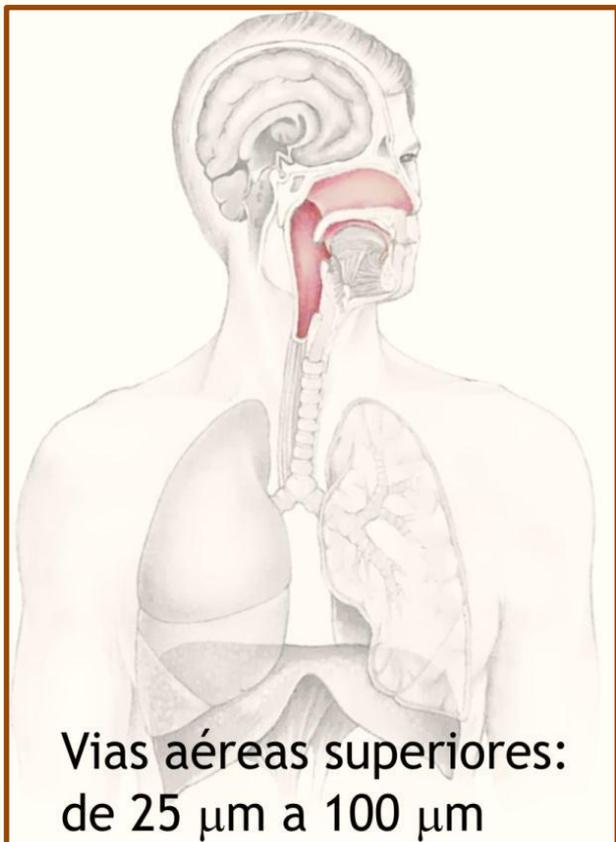
Estados de Agregação

- **Fumaças:** partículas originadas de combustão incompleta, menores do que $0,1 \mu\text{m}$. *Queima de combustíveis.*



Estados de Agregação

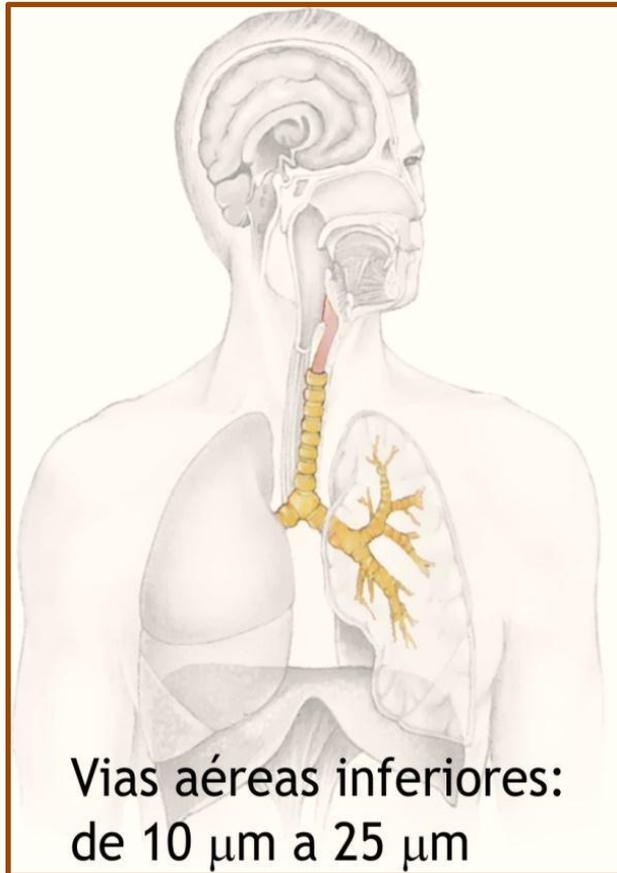
- **Partículas inaláveis, torácicas e respiráveis:**



INALÁVEL : fração de uma nuvem de poeira suspensa no ar que pode entrar pelo nariz ou pela boca. É composta por partículas menores que 100 μm (micrometros), sendo capaz de penetrar em várias regiões do trato respiratório, à medida que seu tamanho diminui.

Estados de Agregação

- Partículas inaláveis, torácicas e respiráveis:



TORÁCICA: É uma subfração da fração inalável composta por partículas menores que 25 μm (micrometros), podendo penetrar nas vias aéreas superiores e entrar nas vias aéreas dos pulmões.

Estados de Agregação

- Partículas inaláveis, torácicas e respiráveis:



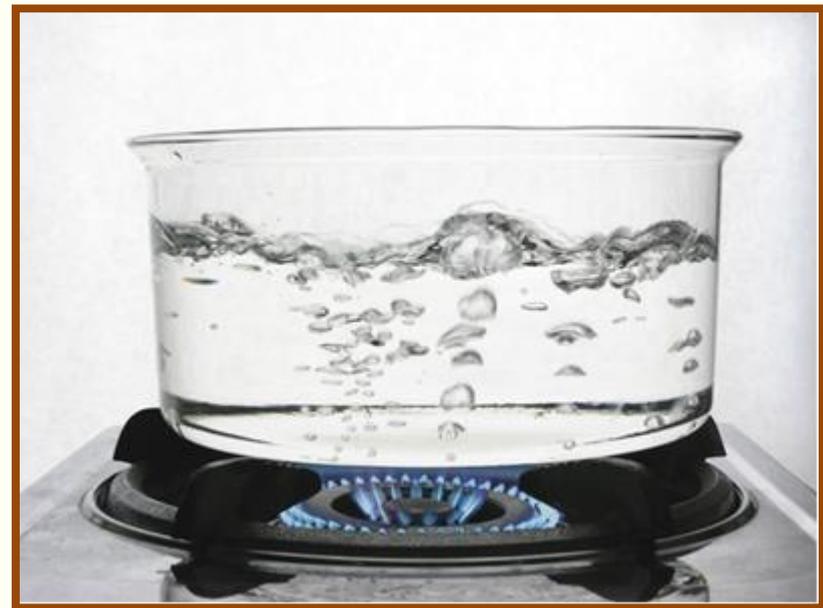
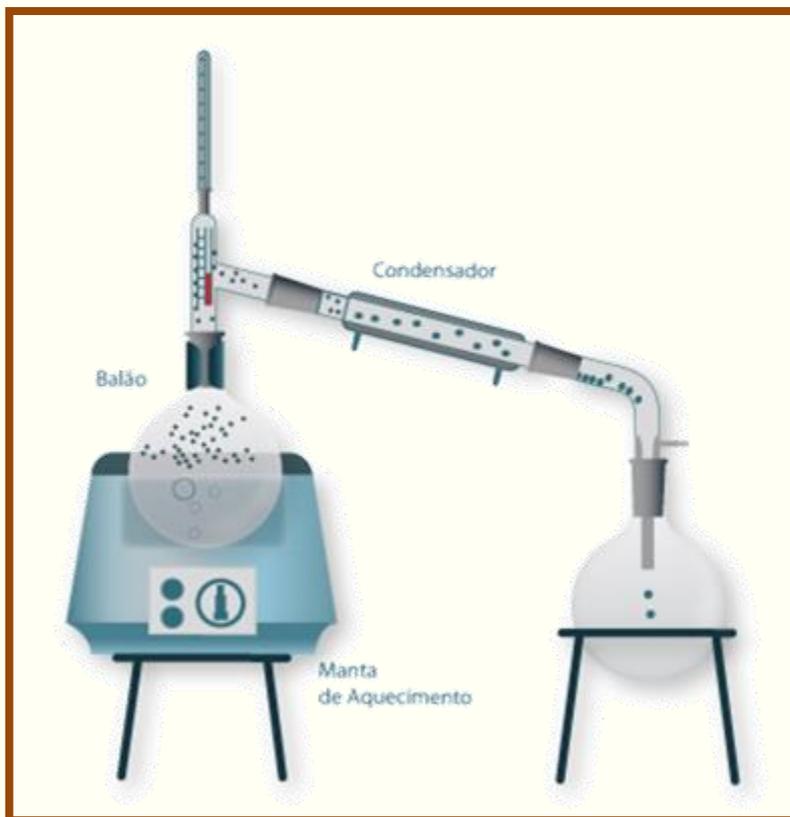
RESPIRÁVEL: É uma subfração da fração torácica do ar inalado composta pelas partículas menores que $10\mu\text{m}$ (micrometros), sendo capaz de penetrar além dos bronquíolos terminais, entrando na região alveolar.

Propriedades Físico-Químicas

- Auxílio na determinação da forma em que o agente químico estará presente no ambiente.
- Forma está relacionada com as possíveis vias de penetração da substância no organismo.
- Prever o risco envolvido na exposição e efeitos nocivos adversos relacionados à exposição.

Propriedades Físico-Químicas

- **Ponto de ebulição:** Temperatura à qual a aplicação de mais calor a um líquido não provoca qualquer aumento de temperatura e o mesmo se converte em vapor.



Propriedades Físico-Químicas

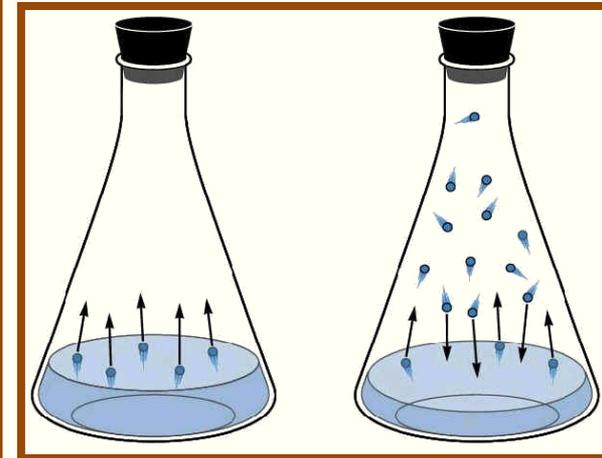
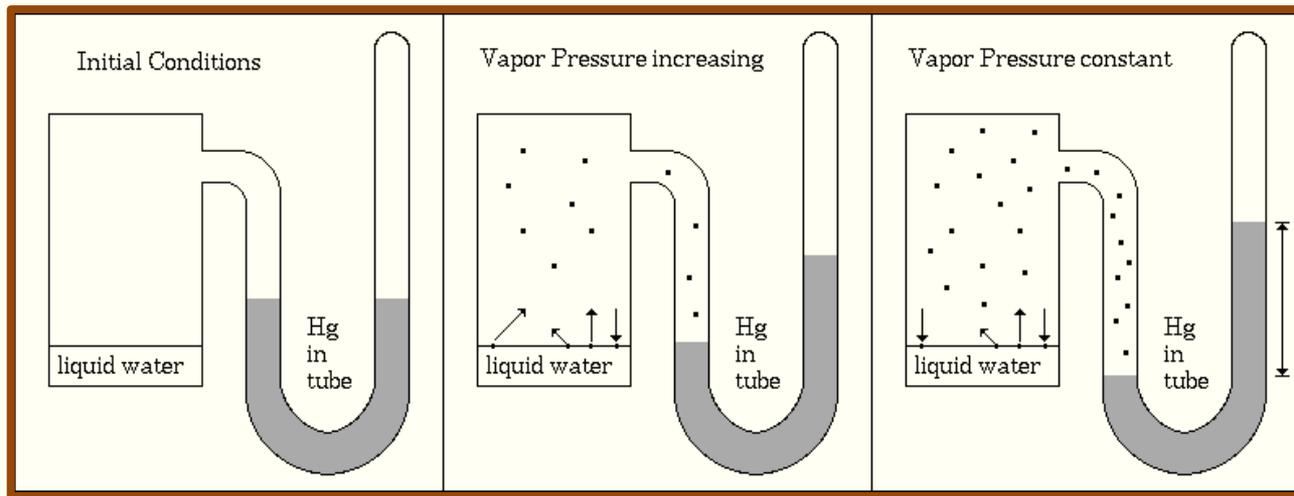
- **Velocidade de Evaporação:**

-Taxa de Evaporação: massa evaporada em uma unidade de tempo. Geralmente determinada tomando-se como referência a taxa de evaporação do **éter etílico**, cujo valor é igual a 1.

Benzeno: * 2,8 (2,8 vezes mais tempo para evaporar que o éter; 2,8 vezes menos volátil).

Propriedades Físico-Químicas

- **Pressão de Vapor:** Pressão exercida pelo vapor de uma substância em equilíbrio com sua forma sólida ou líquida.



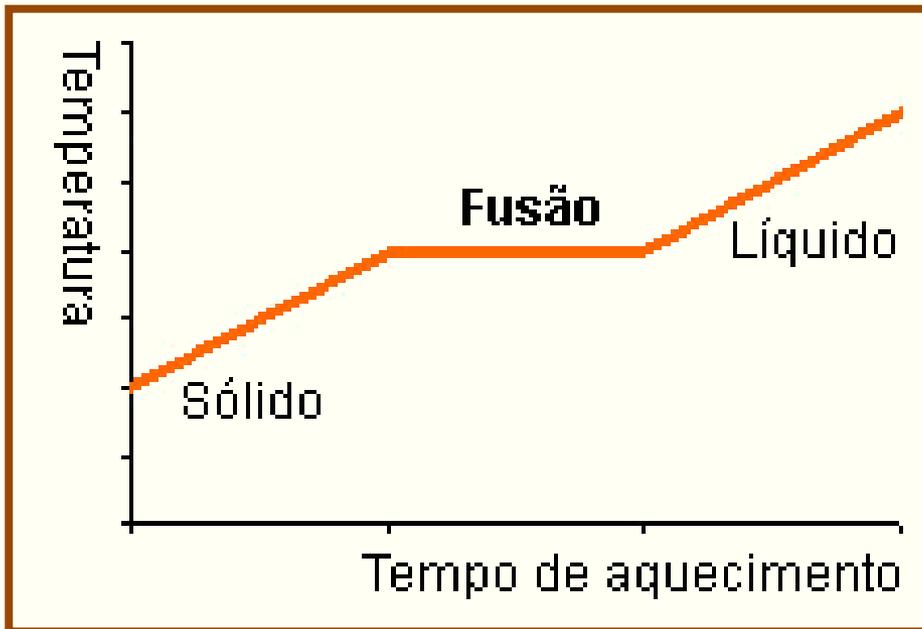
Propriedades Físico-Químicas

Exemplo prático 1. Qual é mais volátil?

Substância	Pto de ebulição	Pressão de vapor	Taxa de evaporação (éter = 1)
Etanol	79°C	5,8 kPa	7,0
Glicerina	290°C	10^{-5} kPa	-
Acetona	56°C	24 kPa	1,9
Ácido acético	118°C	1,5 kPa	11,0

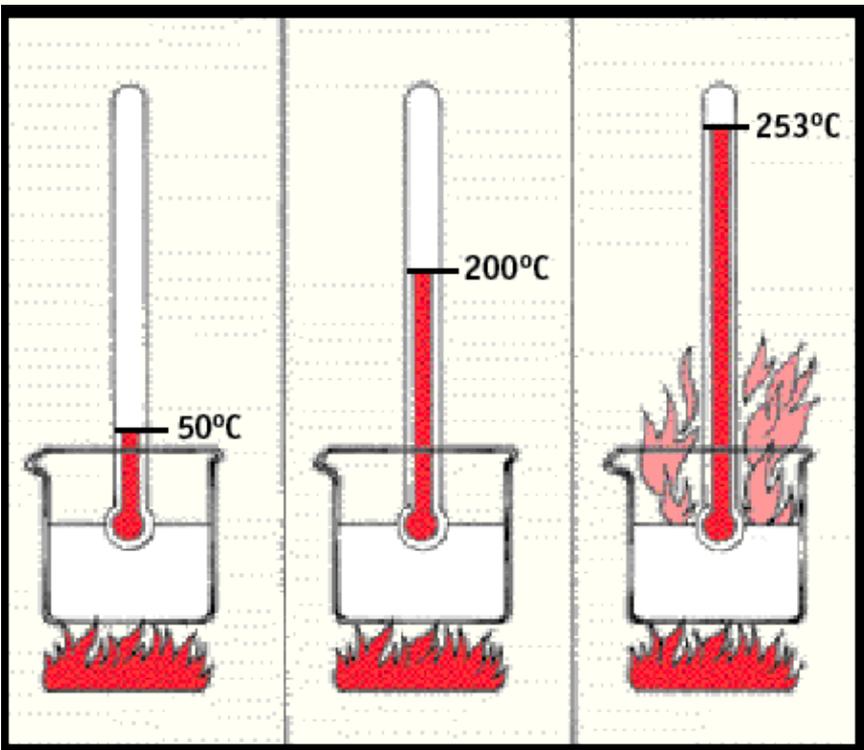
Propriedades Físico-Químicas

- **Ponto de Fusão:** Temperatura na qual ocorre a mudança do estado sólido para o estado líquido.



Propriedades Físico-Químicas

- **Ponto de fulgor** (*flash point*): Menor temperatura (à pressão de 101,3 kPa) em que uma fonte de ignição leva vapores a se **inflamar**.



Substância	Ponto de fulgor
Acetona	-18°C
Etanol	13°C
Gasolina	42,8°C
Óleo de terebintina	30-46°C

- **Qual a substância mais inflamável ?**

Propriedades Físico-Químicas

- Capacidade explosiva ou inflamável de um gás ou vapor: determinada pelo limite de explosividade ou inflamabilidade. Valores em (% Vol).
- **Limite inferior de inflamabilidade:** mínima concentração para que uma mistura de ar + gás/vapor se inflame.
- **Limite superior de inflamabilidade:** ponto máximo onde ainda existe uma concentração de mistura de ar + gás/vapor capaz de se inflamar.

Propriedades Físico-Químicas

- **Temperatura de Autoignição:** Temperatura mínima em que ocorre uma combustão, independente de fonte de ignição. Contato do combustível com oxigênio é suficiente.

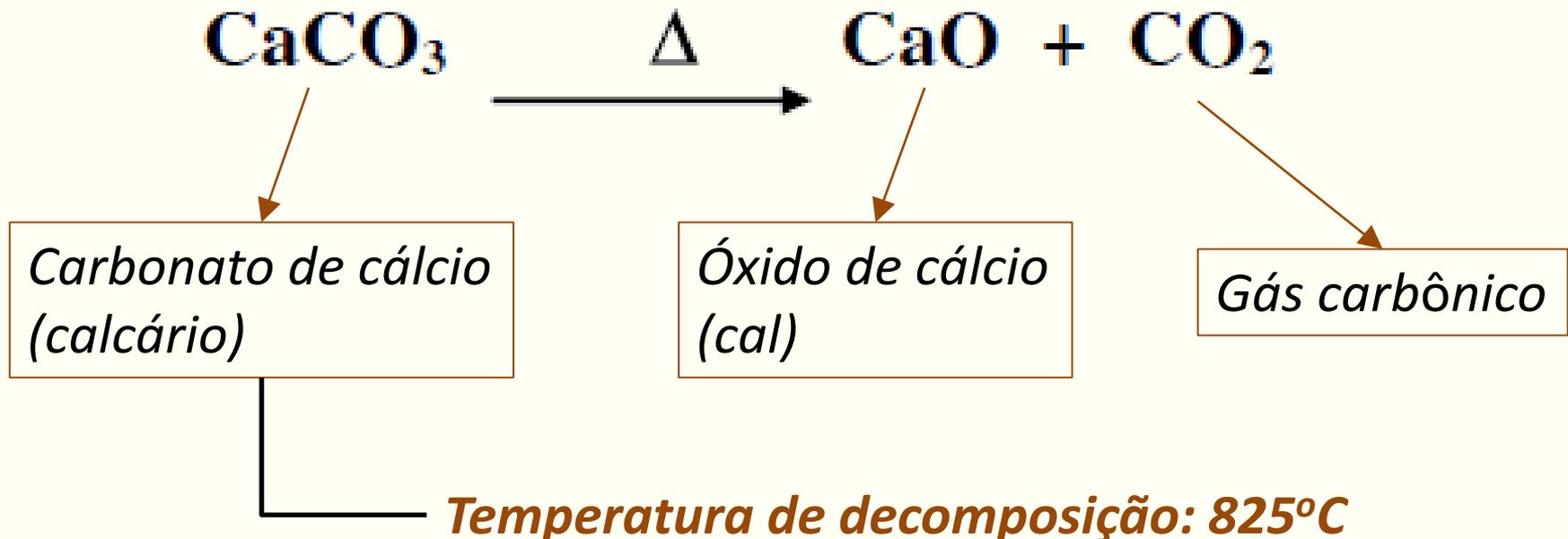


Substância	T auto-ignição
Acetona	465°C
Pentaborano	90°C
Diborano	45-50°C
Tolueno	480°C

Exemplo prático 2. Qual é mais propenso à combustão espontânea em contato com o oxigênio?

Propriedades Físico-Químicas

- **Temperatura de Decomposição:** Temperatura na qual as ligações químicas de uma molécula são rompidas e a substância se decompõe em moléculas menores.

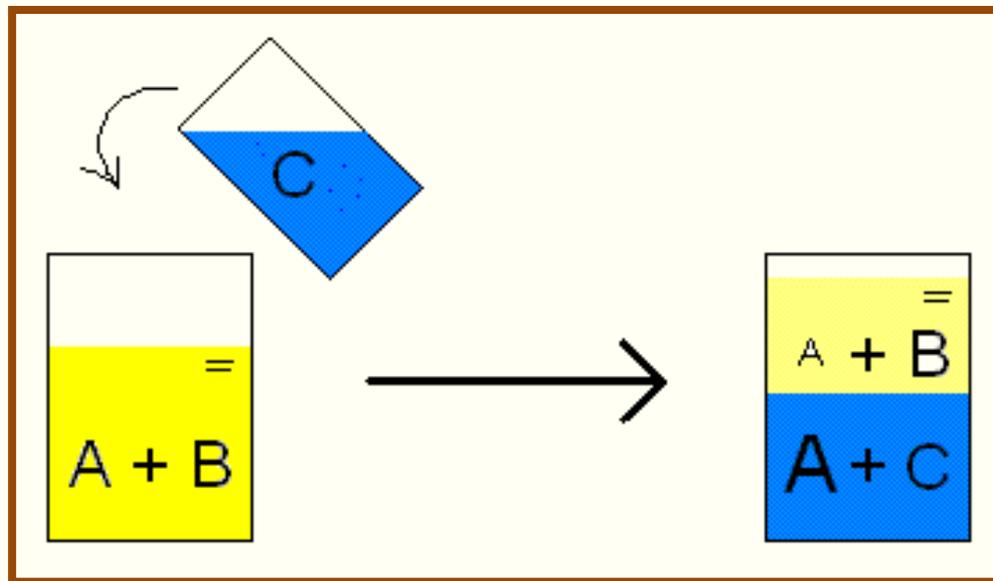


Propriedades Físico-Químicas

- Coeficiente de partição (logPow):

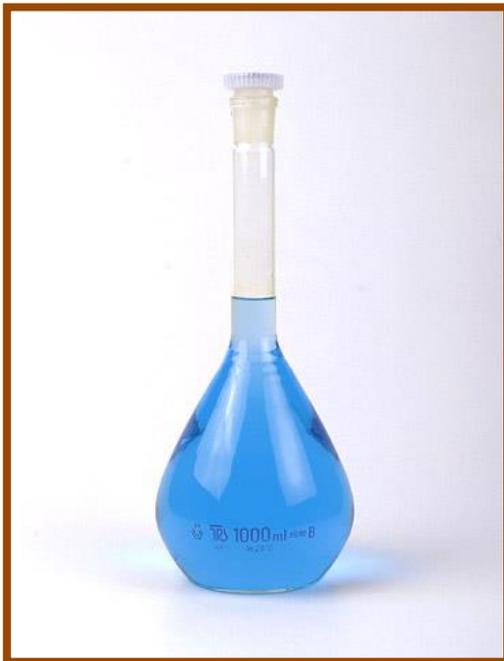
$$P = [\text{fase orgânica}] / [\text{fase aquosa}]$$

O sistema preferencial para determinação do coeficiente de partição é 1-octanol:tampão fosfato pH 7,4.



Propriedades Físico-Químicas

- **Solubilidade em Água:** Quantidade máxima de um sólido ou líquido (soluto) que se dissolve na água (solvente) a determinada temperatura em g.L^{-1} .



Propriedades Físico-Químicas

- **Densidade Absoluta ($\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ou $\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$):**

$$d = \frac{m}{V}$$

d = densidade absoluta
m = massa
V = volume

- *Em 4°C , a densidade da água é $1 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$*



Propriedades físico-químicas

- **Densidade relativa:**

$$d_r = \frac{d_{\text{subs}}}{d_{\text{agua}}}$$

d_r = densidade relativa

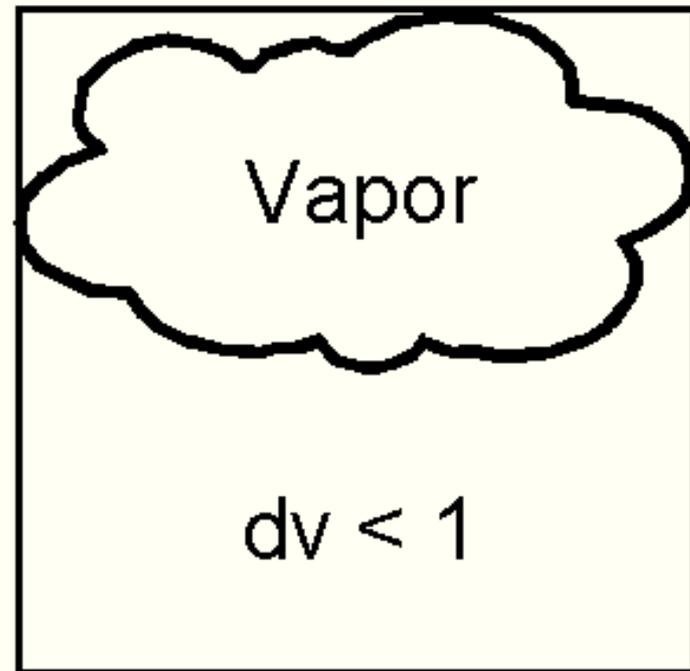
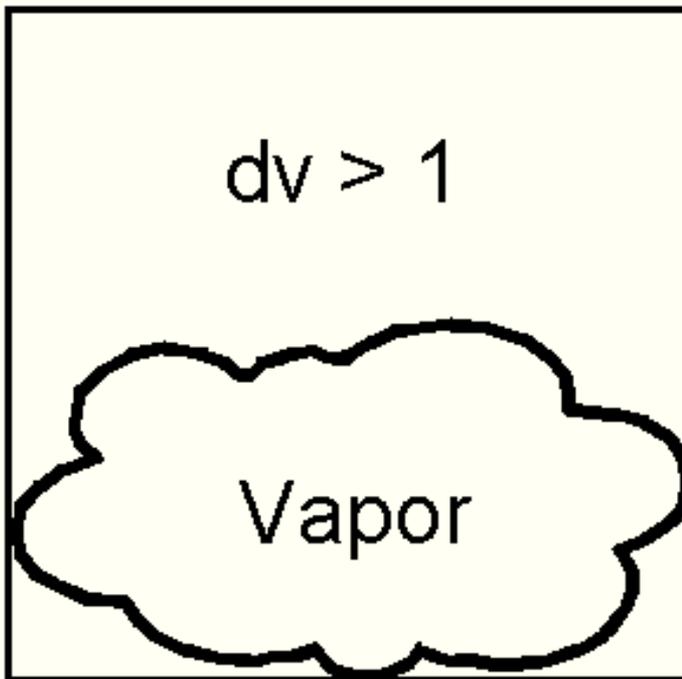
d_{subs} = densidade da substância a 4 °C

d_{agua} = densidade da água a 4 °C



Propriedades Físico-Químicas

- **Densidade do Vapor:** Peso relativo de um gás ou vapor em relação ao ar (que tem um valor arbitrário de 1), nas mesmas condições de pressão e temperatura.



Gás carbônico: $dv = 1,53$

Propriedades Físico-Químicas

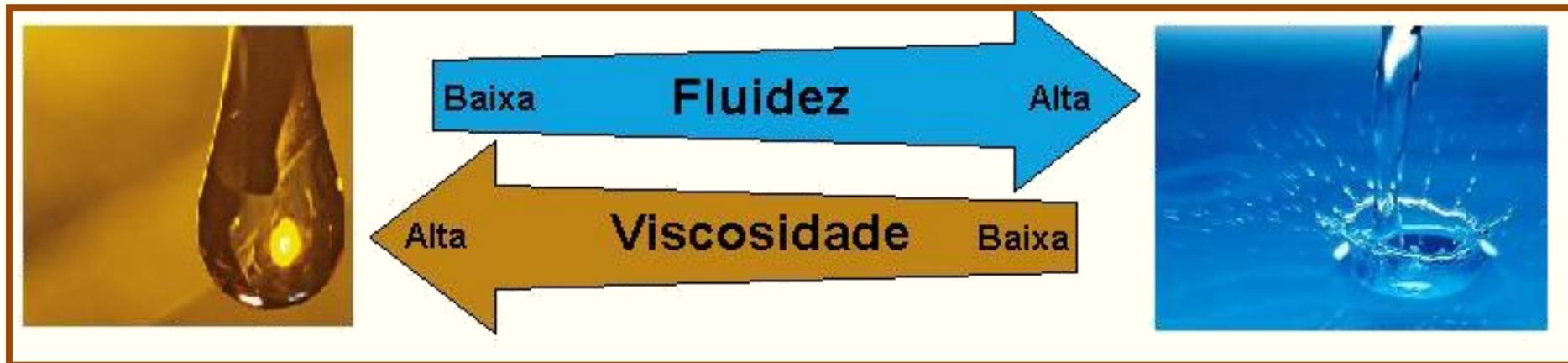
Potencial Hidrogeniônico: pH

Acidez, neutralidade ou alcalinidade em termos da concentração de íons hidrogênio (H^+).



Propriedades Físico-Químicas

- **Viscosidade:** Resistência ao escoamento. Causada pelo atrito interno das moléculas do fluido, em movimento umas contra as outras



Propriedades Físico-Químicas/FISPQ

SEÇÃO 9. Propriedades físicas e químicas

9.1 Informações sobre propriedades físico-químicas básicas

Estado físico	líquido
Cor	incolor
Odor	com sabor de fruta
Limite de Odor	0,1 - 662,5 ppm
pH	5 - 6 em 395 g/l 20 °C
Ponto de fusão	-95,4 °C
Ponto/intervalo de ebulição	56,2 °C em 1.013 hPa
Ponto de combustão	< -20 °C Método: DIN 51755 - 1
Taxa de evaporação	Não existem informações disponíveis.

FISPQ - Acetona

Inflamabilidade (sólido, gás)	não aplicável
Limite inferior de explosividade	2,6 %(V)
Limite superior de explosividade	12,8 %(V)
Pressão do vapor	233 hPa em 20 °C
Densidade relativa do vapor	2,01
Densidade relativa	0,79 g/cm ³ em 20 °C
Solubilidade em água	em 20 °C solúvel
Coefficiente de partição (n-octanol/água)	log Pow: -0,24 (experimental) Não se prevê qualquer bio-acumulação. (Literatura)
Temperatura de auto-ignição	Não existem informações disponíveis.
Temperatura de decomposição	Destilável, sem decomposição, à pressão normal.
Viscosidade, dinâmica	0,32 mPa.s em 20 °C

9.2 Outras informações

Temperatura de ignição	465 °C DIN 51794
Condutibilidade	0,01 µS/cm em 20 °C



ATIVIDADE- COMPLEMENTAR

Preencher tabela com informações das **PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS** das substâncias as quais **MANIPULA**.

Comparar com os sites de consulta indicados nas aulas.

ENTREGAR ATÉ as 21h 27/04/2022

28 de Abril

**Dia Internacional em Memória às Vítimas
de Acidentes e Doenças Relacionadas ao Trabalho**

Por que esta Data?

ENTREGAR, no moodle, até as 16h



Produtos químicos: fontes de consulta

- **European Chemical Substances Information System:**<https://echa.europa.eu/information-on-chemicals>
- **Programme on Safety and Health at Work and the Environment (SafeWork)**
<http://www.ilo.org/safework/lang--en/index.htm>
- **International Chemical Safety Cards (ICSC)**
<http://www.ilo.org/icsc>
- **International Programme on Chemical Safety**
<http://www.inchem.org/>

Produtos químicos: fontes de consulta

- **Cetesb – manual de produtos químicos**

http://sistemasinter.cetesb.sp.gov.br/produtos/produto_consulta_nome.asp

- **NIOSH safety cards**

<http://www.cdc.gov/niosh/ipcsneng/nengicsc.html>

- **ATSDR – substâncias tóxicas**

<http://www.atsdr.cdc.gov/substances/toxsearch.asp>

Fontes de consulta

INFORMAÇÕES TOXICOLÓGICAS (TOXNET):

<https://toxnet.nlm.nih.gov/>

[Chemicals - Hazards magazine](#)

[Chemical Substance Search \(echemportal.org\)](#)

[PubChem \(nih.gov\)](#)

[CAMEO Chemicals | NOAA](#)

<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/cl-inventory-database>



F
U
N
D
A
C
E
N
T
R
O



TABELA DE REATIVIDADE QUÍMICA

**EXEMPLO -
CONSULTA**

Nome do grupo de reatividade					
1	Ácidos minerais não oxidantes (ác. clorídrico)	1			
2	Ácidos minerais oxidantes (ác. nítrico)		2		
3	Ácidos orgânicos (ác. acético)		G H	3	
4	Álcoois e glicóis (etanol; glicerina)	H	H F	H P	4
5	Aldeídos (folmaldeído)	H P	H F	H P	

Código	Consequência
H	Reação exotérmica (geração de calor)
F	Fogo
G	Formação de gás não inflamável e inócuo
GT	Formação de gás tóxico
GF	Formação de gás inflamável
E	Explosão
P	Polimerização violenta
S	Solubilização de substância tóxica
U	Possivelmente perigoso, mas desconhecido



EXEMPLO - CONSULTA

#	REACTIVITY GROUP NAME				
1	Acids, Mineral, Non-oxidizing	1			
2	Acids, Mineral, Oxidizing		2		
3	Acids, Organic		G		
			H	3	
4	Alcohols and Glycols	H	F	P	4
		H	H	H	
5	Aldehydes	P	F	P	

CODE	CONSEQUENCE
H	Heat Generation
F	Fire
G	Innocuous and non-flammable gas generation
GT	Toxic Gas formation
GF	Flammable Gas formation
E	Explosion
P	Violent Polymerization
S	Solubilization of toxic substance
U	May be hazardous, but Unknown

http://rehs.rutgers.edu/lswaste_epachem.html

<http://www.dnr.mo.gov/env/hwp/forum/1105EPADetermineCompatib.pdf>





Ácidos inorgânicos	1	1	Ácidos inorgânicos																																														
Ácidos orgânicos	2	X	2	Ácidos orgânicos																																													
Bases	3	X	X	3	Bases																																												
Aminas	4	X	X	4	Aminas																																												
Compostos halogenados	5	X		X	X	5	Compostos halogenados																																										
Alcoóis, glicóis e glicoésteres	6	X					6	Alcoóis, glicóis e glicoésteres																																									
Aldeídos	7	X	X	X	X		X	7	Aldeídos																																								
Cetonas	8	X		X	X			X	8	Cetonas																																							
Hidrocarbonetos saturados	9								9	Hidrocarbonetos saturados																																							
Hidrocarbonetos aromáticos	10	X							10	Hidrocarbonetos aromáticos																																							
Olefinas	11	X				X				11	Olefinas																																						
Derivados de petróleo	12									12	Derivados de petróleo																																						
Ésteres	13	X		X	X						13	Ésteres																																					
Monômeros e ésteres polimerizáveis	14	X	X	X	X	X	X								14	Monômeros e ésteres polimerizáveis																																	
Fenóis	15			X	X		X								X	15	Fenóis																																
Óxidos de alcoilena	16	X	X	X	X		X	X							X	X	16	Óxidos de alcoilena																															
Cianidrinhas	17	X	X	X	X	X	X								X		17	Cianidrinhas																															
Nitrilas	18	X	X	X	X										X		18	Nitrilas																															
Amônia	19	X	X				X	X					X	X	X	X	X	19	Amônia																														
Halogênios	20			X		X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X		X	20	Halogênios																													
Éteres	21	X													X			X	21	Éteres																													
Fósforo	22	X	X	X														X	22	Fósforo																													
Enxofre fundido	23							X	X	X	X						X		X	23	Enxofre fundido																												
Anidridos ácidos	24	X		X	X		X	X							X		X	X	X	X	X					24	Anidridos ácidos																						
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23																									



<u>EXEMPLO - CONSULTA</u>	Ácidos inorgânicos Ác. clorídrico	Ácidos oxidantes Ác. nítrico	Ácidos orgânicos Ác. acético	Alcalinos (bases) Hidróxido de sódio	Oxidantes Peróxido de hidrogênio	Tóxicos inorgânicos Dicromato de potássio	Tóxicos orgânicos Fenol	Reativos c/ água Sódio metálico	Solventes orgânicos Tolueno
Ácidos inorgânicos Ácido clorídrico									
Ácidos oxidantes Ácido nítrico									
Ácidos orgânicos Ácido acético									
Alcalinos (bases) Hidróxido de sódio									
Oxidantes Peróxido de hidrogênio									
Tóxicos inorgânicos Dicromato de potássio)									
Tóxicos orgânicos Fenol									
Reativos com água Sódio metálico									
Solventes orgânicos Tolueno									