



Revista EIA
ISSN 1794-1237
e-ISSN 2463-0950
Año XIX/ Volumen 20/ Edición N.39
Enero-Junio de 2023
Reia3916 pp. 1-24

Publicación científica semestral
Universidad EIA, Envigado, Colombia

**PARA CITAR ESTE ARTÍCULO /
TO REFERENCE THIS ARTICLE /**

Rivera Flórez, L.; Molina Pérez, F.;
Ramos Contreras, C.

La química verde como herramienta
para la gestión ambiental en
laboratorios de ensayo: aplicación
en la determinación de mercurio en
aguas por espectrofotometría de
absorción atómica de vapor frío.
Revista EIA, 20(39), Reia3916.
pp. 1-24.
<https://doi.org/10.24050/reia.v20i39.1644>

 *Autor de correspondencia:*

Rivera Flórez, L. (Laura)
Estudiante Ms. Gestión ambiental
Universidad de Antioquia, Química
ambiental.
Correo electrónico:
laura.rivera1@udea.edu.co

Recibido: 19-09-2022

Aceptado: 12-09-2022

Disponible online: 01-01-2023

La química verde como herramienta para la gestión ambiental en laboratorios de ensayo: aplicación en la determinación de mercurio en aguas por espectrofotometría de absorción atómica de vapor frío

 **LAURA MARÍA RIVERA FLÓREZ¹**

FRANCISCO JOSÉ MOLINA PÉREZ¹

CARLOS DANIEL RAMOS CONTRERAS¹

1. Universidad de Antioquia

Resumen

Los laboratorios de ensayo que analizan parámetros en matrices ambientales suelen emplear métodos estándar de análisis que implican almacenamiento, manejo de materias primas y gestión de los residuos generados. En el laboratorio caso de estudio, existe una problemática debido al control parcial en la generación y disposición de residuos, uso de materias primas y reactivos peligrosos, además de métodos que implican pretratamientos y tamaños de muestra que generan considerables volúmenes de residuos. Se plantea como objetivo un diagnóstico del desempeño ambiental de los métodos usados en análisis de matrices ambientales con principal énfasis en el caso de estudio y respectivo comparativo de dos metodologías para la determinación de mercurio, seguido de un análisis multicriterio (TOPSIS, RGB, HEXAGON) para evaluar el veredor del proceso analítico. El presente artículo como producto del análisis comparativo, propone la implementación de un método analítico basado en la norma EPA 7473 (Mercurio) en matrices acuosas con impacto favorable en el veredor del método analítico, disminución de huella de carbono y generación de volúmenes de muestras contaminadas con metales pesados como alternativa a metodologías convencionales como la espectrofotometría de absorción atómica de vapor frío (CVAAS). La evaluación multicriterio RGB mostró buen rendimiento analítico. HEXAGON evidenció alta penalización por uso de reactivos peligrosos. Finalmente, TOPSIS se identificó como el método con mayor simplicidad de operación.

Palabras clave: Laboratorio de análisis; Medio ambiente; Química verde; Residuos.

Green chemistry as a tool for environmental management in testing laboratories: application in the determination of mercury in water by cold vapor atomic absorption spectrophotometry

Abstract

Test laboratories that analyze parameters in environmental matrices usually use standard analysis methods that involve storage, handling of raw materials and management of the waste generated. In the case study laboratory, there is a problem due to the partial control in the generation and disposal of waste, use of raw materials and dangerous reagents, as well as methods that involve pretreatment and sample sizes that generate considerable volumes of waste. The objective is a diagnosis of the environmental performance of the methods used in the analysis of environmental matrices with main emphasis on the case study and respective comparison of two methodologies for the determination of mercury, followed by a multicriteria analysis (TOPSIS, RGB, HEXAGON) to assess the greenness of the analytical process. This article, as a product of the comparative analysis, proposes the implementation of an analytical method based on the EPA 7473 standard (Mercury) in aqueous matrices with a favorable impact on the greenness of the analytical method, a decrease in the carbon footprint and the generation of volumes of contaminated samples. with heavy metals as an alternative to conventional methodologies such as cold vapor atomic absorption spectrophotometry (CVAAS). RGB multicriteria evaluation showed good analytical performance. HEXAGON showed a high penalty for the use of dangerous reagents. Finally, TOPSIS was identified as the method with the greatest simplicity of operation.

Keywords: Analysis laboratory; Environment; green chemistry; Waste.

1. Introducción

El interés por la protección del medio ambiente aumenta constantemente en el gremio de los laboratorios de análisis, debido a que la mayoría de ellos tienen un impacto ambiental significativo: generan residuos tanto sólidos como líquidos durante el desarrollo de sus metodologías, presentando un riesgo inherente en: algunos tipos de muestras, alícuotas de reactivos y solventes utilizados, además del consumo de energía relacionado con equipos que producen desperdicio y emisiones provenientes de los numerosos pasos de metodologías analíticas empleadas y descritas en detalle por Guardia, Garrigues y

ProQuest (2011). Por lo tanto; se hace necesario examinar los procesos y actividades químicas que pueden afectar el medio ambiente, tanto a nivel de laboratorio como a escala industrial (Namieśnik, 2001).

En la actualidad, la “química verde” ofrece a la industria una posible solución para la gestión de residuos y su minimización, especialmente en aspectos importantes como el tratamiento y la recuperación de sustancias químicas (Ramírez, et al., 2017). Sin embargo, persiste la problemática relacionada con el riesgo inherente de las metodologías de química analítica y su contribución en el aumento de la cantidad de contaminación y otros problemas ecológicos. Por lo que es importante trabajar en ecologizar los métodos analíticos, mientras se toma bajo consideración aspectos claves como la precisión y la sensibilidad de los métodos (Rutkowska, et al., 2019). Así mismo, una forma interesante de abordar problemas multiobjetivo en análisis químico es la aplicación del análisis de decisiones multicriterio (MCDA). Estas técnicas difieren en sus mecanismos debido al uso de varios métodos matemáticos (algoritmos), tal es el caso de la forma de asignación de los valores de ponderación a los criterios, dado que se puede hacer de una manera específica y distinta en cada método (Nowak, et al., 2020).

Los análisis multicriterio más ampliamente conocidos y utilizados en el área de química son: TOPSIS (técnica para el orden de preferencia por similitud con la solución ideal), AHP (proceso de jerarquía analítica) y PROMETHEE (método de organización de clasificación de preferencias para el enriquecimiento). Una las ventajas del análisis de decisión multicriterio (MCDA) radica en que la mayoría de los programas permiten que los resultados obtenidos sean presentados en forma de gráficos y diagramas claros, tal es el caso del algoritmo HEXAGON, una herramienta cuantitativa hexagonal que comprende la calificación de cinco variables de un método de análisis químico, mediante la asignación de puntos de penalización (PP). Las variables se dividen en cinco grupos: características analíticas o figuras de mérito, riesgos químicos y para la salud asociados, respeto al medio ambiente, sostenibilidad y coste económico (Bystrzanowska, Petkov & Tobiszewski, 2020).

Por su parte el modelo RGB desarrolla y amplía el concepto de “verdor” de un método analítico a través de colores primarios asignados a otros atributos básicos de una metodología de análisis químico, el color resultante de un método está determinado por la contribución del rojo y componentes verde y azul. El color rojo (R) se

asigna al rendimiento analítico expresado por criterios de validación, que son una medida de la calidad del resultado analítico, el verde (G) a la seguridad y el respeto al medio ambiente, y el azul (B) a la eficiencia práctica y la productividad (Fabjanowicz, Płotka-Wysyłka y Namieśnik, 2018).

El presente trabajo tiene como objetivo la evaluación del desempeño ambiental de las metodologías aplicadas en análisis de matrices ambientales con principal énfasis en el análisis comparativo de dos métodos analíticos actual (SM 3112B) y propuesto (EPA 7473) para la determinación de mercurio por absorción atómica de vapor frío (CVAAS) en matrices ambientales del laboratorio caso de estudio. Seguido de la aplicación de herramientas de análisis multicriterio (RGB, TOPSIS, HEXAGON) para evaluar el verdor del método de interés y posibles soluciones a los aspectos e impactos ambientales generados, mediante una estrategia propuesta.

2. Materiales y metodos

2.1 Área de estudio

Como caso de estudio, y para objetivo de este trabajo, se eligió el laboratorio de matrices ambientales del grupo de investigación GAIA (Grupo de Investigación en Gestión y Modelación Ambiental), un laboratorio ubicado en la ciudad de Medellín, Colombia el cual se dedica a la realización de estudios fisicoquímicos, toxicológicos y microbiológicos en ecosistemas acuáticos y terrestres y en ambientes industriales.

La propuesta de la gestión y minimización de residuos fue dividida en 3 fases principales que permitieron orientar y definir por escrito la puesta en marcha del programa (Subdirección ambiental, 2020). A través de un conjunto de actividades operativas enfocadas en la estrategia de la prevención de la contaminación, principio básico de la química según Cuellar (2009). La primera fase fue un diagnóstico y revisión documental, la segunda fue la evaluación del verdor de un método analítico mediante un análisis comparativo de dos métodos de determinación de mercurio en matrices ambientales y por último una fase de elaboración de una propuesta de gestión de residuos basada en la química verde.

2.2 Fase diagnóstica: Recolección de la información e inspección

Como punto de partida, se realizó la observación directa de las instalaciones y documentación del área operativa del laboratorio caso de estudio verificando la situación actual a nivel documental, cumplimiento normativo, identificación y evaluación de aspectos e impactos ambientales. Se centró la atención en el método de determinación de mercurio total en aguas naturales por espectrofotometría de absorción atómica de vapor frío (CVAAS).

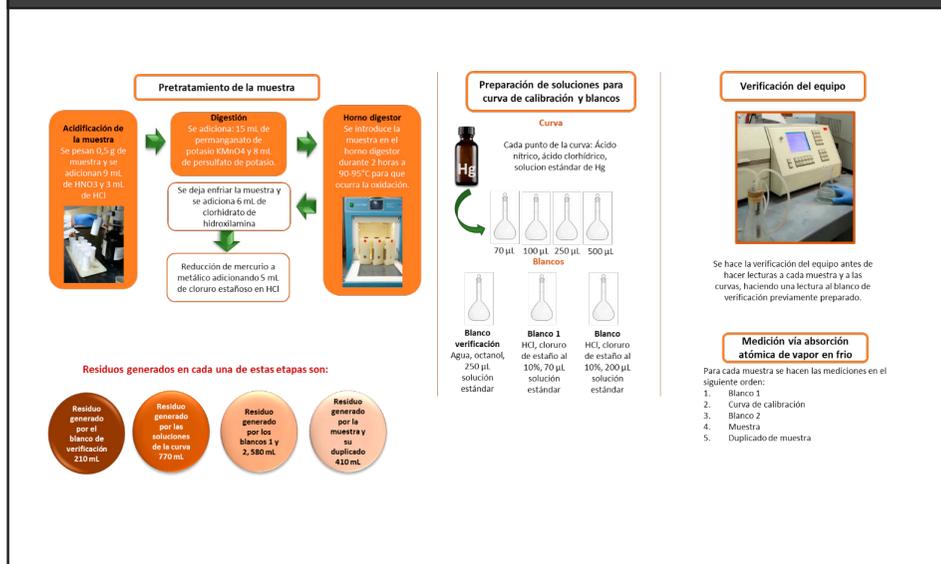
2.3. Evaluación verde de las metodologías para el caso de estudio

2.3.1 Definición de método caso de estudio

La propuesta de la gestión verde tuvo como enfoque la evaluación del verdor de uno de los procedimientos analíticos más empleados en el laboratorio caso de estudio: determinación de mercurio total en aguas naturales por espectrofotometría de absorción atómica de vapor frío (CVAAS), de acuerdo con las directrices de SM (Standard Methods) 3112B. Es un método que merece un importante enfoque ya que es uno de los métodos validados del laboratorio y de los más empleados por lo que requiere una gran atención en la generación de residuos, puesto que estos tienen un control parcial, con posibilidades de fortalecimiento, dichos residuos son peligrosos por el contenido de metales pesados, representando un volumen importante de residuo contaminado por muestra analizada.

El método consta de cuatro etapas, la primera de ellas consiste en acidificación y digestión de la muestra, es un pretratamiento de la muestra donde se lleva a cabo una digestión ácida que a su vez genera un residuo acuoso, la segunda etapa consiste en la preparación de las soluciones blanco y curva de calibración que son posteriormente utilizadas en las mediciones y seguidamente descartadas generando también un residuo considerable, posteriormente en la tercera etapa se realiza la verificación del equipo que implica el uso de soluciones blanco y patrón donde efectivamente se generan más sustancias residuales. Finalmente, en cuarto lugar, se procede a realizar la medición y lectura de la muestra en el equipo vía absorción atómica de vapor frío (CVAAS). Las cuatro etapas se ilustran en la Figura 1.

Figura 1. Metodología seguida en el análisis de determinación de mercurio con los puntos generadores de residuos



2.3.2. Evaluación verde la metodología seleccionada para el caso de estudio mediante métodos de análisis multicriterio (TOPSIS, HEXAGON, RGB)

Posteriormente se realizó la evaluación verde del método de determinación de mercurio, dicha evaluación se ejecutó mediante la aplicación de una herramienta de apoyo para la optimización y desarrollo de los métodos analíticos basada en el análisis de decisiones multicriterio (MCDA), este tipo de análisis permite describir un problema utilizando valores numéricos y que con la aplicación de un algoritmo adecuado permite obtener una clasificación de las opciones disponibles en orden de preferencia de acuerdo con Bystrzanowska y Tobiszewski (2020). La aplicación de la herramienta de evaluación del carácter verde (análisis de decisiones multicriterio) para el método analítico de determinación de mercurio del laboratorio GAIA, se realizó con ayuda de la base de datos previamente obtenida en la fase diagnóstico específicamente del informe de la validación de dicho método y otros criterios arrojados en la fase diagnóstico.

En primer lugar, se definió un problema, por lo que se especificó el propósito de la evaluación, se requirió también elegir las partes interesadas que participaron en el proceso de toma de decisiones. Sin embargo, debido al alcance del presente documento se remitió a un único responsable de la toma de decisiones (DM). Entre las alternativas,

se seleccionó la mejor solución con referencia a las condiciones de evaluación dadas. El siguiente paso es la definición de un conjunto de criterios que permitan describir y comparar las alternativas disponibles para la opción más adecuada. Otro elemento que se tuvo en cuenta es la ponderación de los criterios (preferencias del único responsable al evaluar la importancia de cada criterio), debido a que esta etapa permite indicar la dirección del análisis, de modo que podrán incluirse criterios metrológicos, medioambientales o económicos. La selección y aplicación de un método MCDA es el penúltimo paso, para ello se tendrán como posibles opciones a aplicar en el caso de estudio las herramientas (TOPSIS, HEXAGON, RGB) más usadas en los procesos de selección de procedimientos analíticos de acuerdo con reportes en la literatura Aenishaenslin, et al. (2013). La hoja de cálculo de Excel utilizada para la evaluación según los principios MCDA se basó en la plantilla desarrollada por Nowak, et al. (2020). Finalmente se procedió a la interpretación de los resultados, presentados, seguido por la elección de la alternativa más adecuada.

2.4. Fase de diseño de herramienta de química verde a ser aplicado en caso de estudio

2.4.1 Elaboración de la propuesta de gestión de residuos basada en química verde

Análisis comparativo de resultados obtenidos entre la estrategia actual y la propuesta, Química verde en la gestión de residuos

A continuación, se presentó una propuesta basada en los principios de la química verde descritos en detalle por Rodríguez (2019) y la normatividad vigente Decreto 1076 (2015). La propuesta de valor implementada se basó en la prevención y minimización de los residuos generados, y las estrategias de optimización en los procesos

Analíticos que permitieron mejorar la gestión integral de los residuos generados en el laboratorio, evitando formación de sustancias peligrosas o aumento en los residuos, contribuyendo así a la prevención de la contaminación (principio propio de la química verde). Los residuos generados en el laboratorio provienen, en gran proporción, de los reactivos químicos en desuso o vencidos y muestras analizadas con presencia de reactivo o sin analizar, por lo tanto, demandan, además del costo de adquisición de los reactivos, una inversión para la disposición y/o tratamiento de los residuos.

Finalmente, con base a los resultados e información obtenida en las fases diagnóstico y diseño de la herramienta de química verde, se pudo definir la viabilidad de la estrategia presentada para el manejo de residuos bajo gestión verde. En aspectos tanto económicos como ambientales (matriz de viabilidad técnica y ambiental). Una vez establecida la propuesta nueva a implementar, se realizó un cuadro comparativo entre las dos metodologías (la actual SM 3112B y la propuesta EPA 7473) con el fin de establecer las ventajas que tendría una mejora de lo ya existente, en base a criterios propios de la química verde como tamaño de muestra según especificaciones técnicas de los equipos (BUCK SCIENTIFIC 410 Mercury Analyzer y sistema de analizador directo de mercurio DMA-80), uso de reactivos peligrosos según métodos estándar SM 3112B (2017) y EPA 7473 U.S. (1998), consumo energético (especificaciones técnicas BUCK SCIENTIFIC 410 Mercury Analyzer y DMA-80), generación de residuos (medición volumétrica con probeta de 1000 mL de los residuos generados en cada una de las etapas analíticas método actual en el laboratorio caso de estudio) descrito en detalle en la Figura 2 del presente documento, además del control y manejo de residuos, entre otros (ver Tabla 5).

Después de recolectar la información en el laboratorio GAIA (documentos, registros fotográficos etc.) se evidencia que hay muchos aspectos por mejorar y muchas debilidades asociadas al etiquetado de materia prima, y manejo de residuos sólidos y líquidos, provenientes de varios procesos fisicoquímicos validados, se procede a la realización de un análisis estratégico del caso de estudio por medio de una matriz DOFA (Cordina, 2011), donde se identifican tanto las fortalezas como las debilidades del laboratorio, y las oportunidades de mejora (Valencillos, 2021). lo anterior con el fin de consolidar la información requerida para el posterior análisis comparativo entre métodos de determinación de mercurio en matrices ambientales, y así proponer estrategias que puedan ser implementadas desde los principios de la química verde. En la Tabla 1 se ilustra la matriz DOFA.

De la revisión del protocolo de validación y/o análisis de eficiencia analítica para el método CAAVAS empleado actualmente por el laboratorio caso de estudio, se obtuvo la información presentada en la Tabla 2, donde se encuentran consignados los criterios a evaluar establecidos según la herramienta de análisis multicriterio (MCDA), estos descritos en detalle en estudios asociados Tobiszewski y Orłowski (2015) y Gaioli, et al. (2012).

3. Resultados y análisis

3.1. Identificación y evaluación de aspectos e impactos ambientales para el caso de estudio

Tabla 1. Matriz DOFA

Fortalezas (F)	Debilidades (D)
<p>1. Cuenta con áreas aisladas y definidas para cada uno de los métodos que se emplean (Fisicoquímicos, microbiológicos, eco toxicológico)</p>	<p>1. Dentro del área de almacenamiento y preparación de los reactivos químicos, se encuentran reactivos contaminados, los cuales cambian en sus propiedades físicas y químicas, lo que los convierte directamente en residuos.</p>
<p>2. Se cuenta con un acertado sistema de etiquetado (aplicativo etiquétame) de las materias primas de ingreso y salida que sirve como guía para determinación de las Peligrosidades</p>	<p>2. Se observan reactivos químicos sin etiquetar dentro del área de almacenamiento lo que podría representar un peligro.</p>
<p>3. Almacenamiento de reactivos adecuado debidamente rotulados y separados de acuerdo con el grado de peligrosidad.</p>	<p>3. No hay una actualización recurrente de la información en el aplicativo relacionado con inventario de insumos químicos.</p>
<p>4. Los reactivos químicos líquidos también están clasificados respecto al criterio de contenido de metales, ya que, gracias a esto, se realiza el descarte de residuos.</p>	<p>4. Los residuos de naturaleza orgánica, y los que contienen cianuros, no cuentan con tratamiento previo dentro del laboratorio, el gestor de residuos realiza el descarte y tratamiento del desecho.</p>
<p>5. Cuenta con procesos fisicoquímicos validados o verificados.</p>	<p>5. El laboratorio no cuenta con un registro específico asociado a la cantidad exacta de residuos generados.</p>
<p>6. El laboratorio implementa procesos de desactivación, neutralización, y precipitación de residuos químicos posteriormente son entregados al gestor de residuos.</p>	<p>6. Existe una clasificación parcial, no estandarizada y documentada dentro del laboratorio.</p>

Oportunidades (O)	Amenazas (A)
1. El laboratorio busca alinearse con los estándares de inactivación, tratamiento y minimización de riesgos de los residuos generados con la finalidad de dar cumplimiento normativo.	1. El laboratorio usa grandes cantidades de reactivos en cada una de las metodologías empleadas sin tener documentados procesos para su recuperación y reutilización.
2. Se tienen dispuestas rutas diarias de recolección de residuos por tipo, de todos los laboratorios dentro de la UDEA.	2. No se cuenta con una caracterización de peligrosidad RESPEL. Solo se cuenta con caracterización de los vertimientos de agua residuales.
3. Se tiene contratos vigentes con empresas especializadas en la disposición y descarte de residuos.	3. No se cuenta con métodos de Identificación de peligrosidad RESPEL.
4. Se cuenta con el registro del generador de residuos en el Registro de Generadores ante el IDEAM.	4. No se cuenta con procedimientos para el muestreo y determinación de peligrosidad de un RESPEL
5. Se reporta un estimado de residuos generados en unidades por peso, clasificados Según la normatividad vigente.	5. Los procesos analíticos del caso de estudio generan residuos de carácter infeccioso, reactivo, radiactivo, inflamable, entre otros.

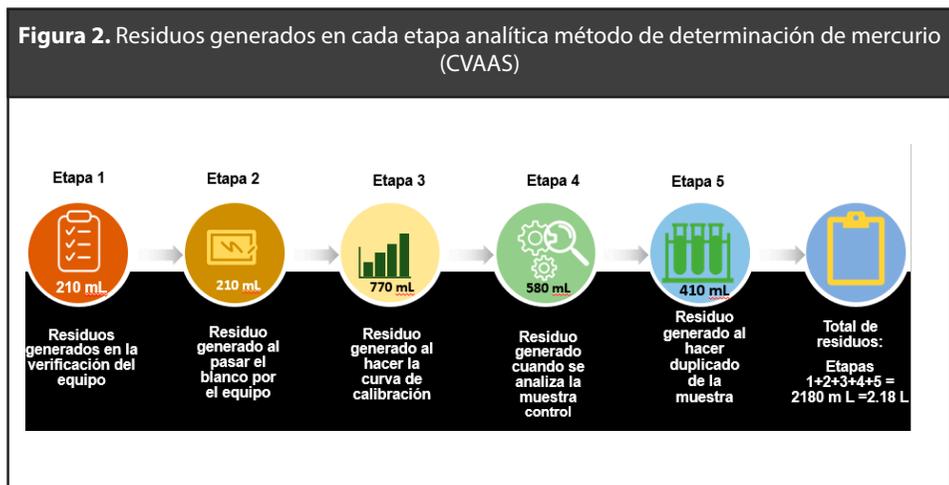
Tabla 2. Criterios evaluados para el método analítico de determinación de mercurio en muestras acuosas mediante análisis multicriterio (RGB, TOPSIS, HEXAGON) para determinación del verdor.

CRITERIOS	VALORES
Linealidad	0,9997
LD / LOD (límite de detección)	0,2 microgramos por litro
LQ (límite de cuantificación)	0,4 microgramos por litro
DS (Desviación estándar)	0,028
Consumo energético	0,05 kW
Precisión RSD (Desviación estándar relativa)	4,8
Exactitud (% recuperación)	88,9%

CRITERIOS	VALORES
Cantidad de residuos generados (agua contaminada con mercurio y otros reactivos)	2,18 L (cantidad por 1 muestra analizada)
Tiempo de análisis	240 minutos
Preservación de la muestra	Aceptable
Almacenamiento	Satisfactorio
Cantidad de muestra	Aceptable
Pretratamiento de la muestra	Deficiente
Portabilidad del equipo	Insuficiente
Robustes del equipo	Aceptable
Frecuencia de calibración	Medianamente aceptable
Toxicidad	Carcinogénico, mutagénico [20]
Tratamiento de residuos	Aceptable
Huella de carbono (Dada en consumo total de energía)	Insuficiente

Nota: Modificado a partir de documento de validación de determinación de mercurio total en agua por espectrofotometría de absorción atómica vapor frío SM 3112B, GAIA.

La Figura 2 esquematiza los resultados obtenidos en la etapa diagnóstico en cuanto a generación de residuos para el método de estudio (CVAAS). Las diferentes etapas de la metodología donde son generados los residuos contaminados con metales como el mercurio y demás reactivos (agua destilada, permanganato de potasio entre otros), demuestran la necesidad de mejora del método analítico actual del laboratorio para la determinación de mercurio en muestras acuosas, debido al volumen considerable generado por muestra analizada (2.18 L).



3.2 Evaluación verde del análisis de mercurio en agua por CVAAS mediante métodos de análisis multicriterio (TOPSIS, HEXAGON, RGB)

- **TOPSIS:** Este método mediante una solución ideal propuesta permitió establecer la similitud del método con la solución ideal creada. Se aplicó el algoritmo TOPSIS para el método de estudio (CVAAS), los criterios de evaluación fueron LOD y precisión asociados al rendimiento analítico. Criterios relacionados con el verdor (volumen de disolventes orgánicos utilizados en el procedimiento, toxicidad de disolventes y la masa de residuos sólidos generados) y demás criterios reportados en detalle en la plantilla desarrollada por Nowak, et al. (2020).

Los resultados obtenidos mediante la evaluación del método de mercurio utilizando la herramienta TOPSIS, se presentan a continuación en la Tabla 3 y 4.

Tabla 3. Criterios usados para evaluación TOPSIS

	LOD [$\mu\text{g/l}$]	RSD [%]	Cantidad de solventes orgánicos [ml]	Cantidad de solventes orgánicos * toxicidad (Peligro)	Cantidad de muestra [g o mL]	Residuo sólido (g)	Otros analitos (por concepto de analito)	Tiempo de análisis [min]
Determinación de mercurio por absorción atómica vapor-frio (CVAAS)	0,025	0,028	1	0	100	0	0	240

Tabla 4. Resultados análisis multicriterio TOPSIS

Método	Similitud con la solución ideal
Determinación de mercurio	0,71

- **HEXAGON:** La asignación de puntos de penalización en una escala de 0 a 4, donde 1 punto representa advertencia y 4 puntos representa peligro (escala relacionada también con rendimiento excelente, bueno, adecuado, débil y fallido respectivamente) de acuerdo con Nowak, et al. (2020), se obtuvo mediante el análisis de variables como características analíticas, riesgo químico y para la salud, medio ambiente, sostenibilidad y costo económico para el método de determinación de mercurio. El resultado de esta evaluación se representa en un pictograma de hexágono, tal como se muestra en la Figura 3. Según los resultados obtenidos de la evaluación de este método, se observa que la mayoría de los criterios están alrededor de 4, esta alta penalización es debida al uso de reactivos peligrosos, la cantidad de residuos generados lo que conduce a un método que no representa una sostenibilidad ambiental.
- **RGB:** El análisis multicriterio para este método se hizo con base en la herramienta (plantilla de Excel) propuesta por Nowak, et al. (2020). Se introdujeron los datos requeridos para una serie de criterios evaluados (rendimiento analítico, seguridad con el medio ambiente, eficacia práctica) descritos en detalle por Nowak, et al. (2020) y Mazzaracchio, et al. (2022), reportados en el documento de la validación del método analítico del caso de estudio. El algoritmo determinó un color “rojo” mostrado en la Tabla 5, tal como se muestra a continuación:

Tabla 5. Resultado evaluación preliminar del método RGB en la metodología de determinación de mercurio

		w=2		w=2		w=2		w=2		w=2	
REDNESS (Rendimiento analítico)	W=8	LINEALIDAD (R2)		LIMITE DE DETECCION		LIMITE DE CUANTIFICACIÓN		PRECISION (RSD)		EXACTITUD (% RECUPERACIÓN)	
	LAV=33.3	0,99		0,02 ug/L		0,15 ug/L		15%		80%	
	LSV=66.6	0,999		0,2 ug/L		0,4 ug/L		2%		120%	
	Result	0,997		0,2 ug/L		0,4 ug/L		4,80%		88,90%	
CS: 77,5%	Score (0-100)	95	95	70	70	75	75	70	70	80	80
GREENNESS (Seguridad con el medio ambiente)	W=8	w=3			w=3			w=3		w=1	
		CANTIDAD DE RESIDUOS			TOXICIDAD DE LOS REACTIVOS QUIMICOS			TOXICIDAD DE LOS RESIDUOS		OTROS RIESGOS LABORALES	
	LAV=33.3	acceptable			acceptable			acceptable		5 riesgos	
	LSV=66.6	satisfactorio			satisfactorio			satisfactorio		2 riesgos	
CS: 52,4%	Result	acceptable			acceptable			deficiente		2 riesgos	
	Score (0-100)	50	50	50	60	60	60	40	40	60	60
BLUENESS (Productividad/eficacia práctica)	W=8	w=2			w=3			w=2		w=3	
		COSTO DE ANALISIS			TIEMPO DE ANALISIS			CONSUMO DE MUESTRA		OTROS ASPECTOS	
	LAV=33.3	acceptable			acceptable			acceptable		acceptable	
	LSV=66.6	satisfactorio			satisfactorio			satisfactorio		satisfactorio	
CS: 51,9%	Result	promedio			moderado			promedio		satisfactorio	
	Score (0-100)	50	50	50	50	50	50	50	50	60	60
COLOR FINAL:		REDNESS		GREENNESS		BLUENESS		BRILLANTEZ (MB):		59,5%	
RED		≥33.3%	≥66.6%	≥33.3%	≥66.6%	≥33.3%	≥66.6%				
		yes	yes	yes	no	yes	no				
Anotación corta: 59red		Anotación larga: 59red(77/8red-52/8green-52/8blue)									

Nota: *Abreviaturas: CS (Puntaje de color); w (Peso o ponderación); LAV (Valor mínimo aceptable); LSV (valor mínimo satisfactorio); MB (Brillantez).

Según los valores introducidos, el método analítico de determinación de mercurio, se clasifica dentro del color rojo con un porcentaje obtenido en el algoritmo de 59,5%, dado por la predicción que genera el análisis multicriterio RGB el cual afirma que el método está caracterizado por tener un buen rendimiento analítico, aunque sólo proporciona un nivel aceptable de seguridad y respeto al medio ambiente y productividad y eficacia práctica. Sin embargo, es de inferir que la aplicación de la herramienta RGB, se presenta como una buena alternativa en caso de que el número de análisis planificados sea relativamente bajo y si no hay más alternativas verdes disponibles.

Por su parte el análisis comparativo entre métodos evidenció que el más sencillo de emplear y que arroja el resultado más conforme respecto a la similitud de la metodología con la solución ideal, es TOPSIS. Sin embargo, es necesario hacer otras comparaciones puesto que aquí solo se está teniendo en cuenta un criterio de comparación, pero se deben evaluar otros factores y características de los métodos

que puedan ajustarse más a las necesidades y herramientas que posea el laboratorio caso de estudio (GAIA) y el método evaluado (determinación de mercurio).

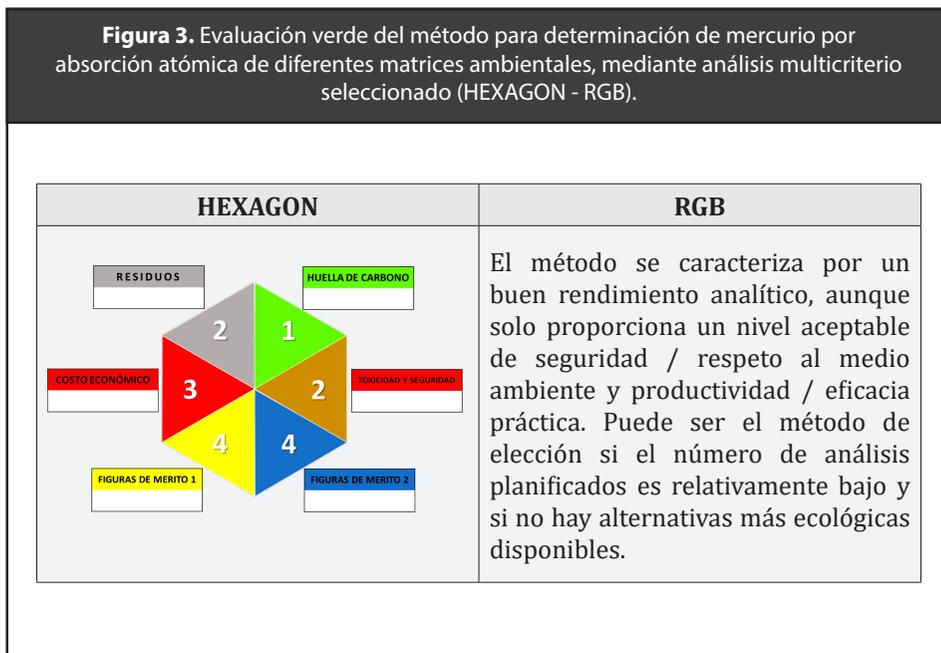
En la Tabla 6 se resumen algunas características de los 3 métodos multicriterio en base a la literatura Nowak, et al. (2020) y resultados obtenidos en el presente estudio.

Tabla 6. Características de los tres métodos de análisis multicriterio

	TOPSIS	HEXAGON	RGB
Puntos fuertes	<p>Facilidad operacional</p> <p>Sencillez en cuanto a interpretación.</p> <p>Amplia aplicabilidad en otros campos además de la clasificación de métodos</p>	<p>Los colores como medio facilitador de interpretación de resultados.</p> <p>Pictograma de resultado visualmente atractivo.</p> <p>Regla de evaluación simple (otorgando puntos de penalización) compatible con la Eco-Scale.</p> <p>Sencillez de interpretación</p>	<p>Los colores como medio facilitador de interpretación de resultados.</p> <p>Flexibilidad en la selección de criterios.</p> <p>Transparencia de la evaluación al proporcionar toda la información en una hoja de cálculo de Excel detallada según criterios del método.</p>
Puntos débiles	<p>No presenta información detallada adicional sobre características del método y criterios a evaluar.</p> <p>Se hace más representativa cuando es aplicada a varios métodos (la evaluación de un solo método se hace difícil sin datos de referencia adicionales)</p>	<p>Requiere conocimiento y experiencia para otorgar puntos de penalización de manera objetiva.</p> <p>La evaluación tiende a ser subjetiva e influenciada por intereses y apreciaciones propias del sujeto a cargo de del análisis multicriterio mediante HEXAGON.</p>	<p>La flexibilidad de las variables de evaluación puede potencialmente disminuir su objetividad.</p> <p>Se debe tener previo conocimiento para entender con mayor facilidad el método, debido a su extensión.</p> <p>La evaluación cuantitativa de algunos criterios es problemática, a veces requiere simplificaciones y suposiciones</p>

Según lo anterior no es tarea fácil seleccionar el método apropiado para la evaluación del verdor de la metodología objetivo del trabajo (determinación de mercurio), sin embargo, puede elegirse el método más deseable y que se ajuste a las necesidades. Aun considerando la simplicidad, del método TOPSIS, además de los resultados de similitud con soluciones ideales, a criterio de los autores se eligen los métodos HEXAGON y RGB puesto que ambos complementan una evaluación completa de criterios, y con el método HEXAGON es posible presentar los resultados de una manera simple y vistosa.

Las herramientas de análisis multicriterio seleccionadas para la evaluación del verdor de la metodología de análisis de mercurio por absorción atómica arrojaron resultados que indican que esta metodología es adecuada desde el punto de vista del rendimiento analítico, pero arroja niveles de alta toxicidad, un considerable impacto como huella de carbono, y un alto consumo de materias primas y generación de residuos, traducido además en altos costos de análisis, así mismo como un considerable consumo energético (ver Tabla 7). De esta manera, la metodología actual requiere de la implementación de una estrategia para la gestión de mejoras en el impacto ambiental negativo que causa.



3.3 Elaboración de la propuesta de gestión de residuos basada en química verde

De acuerdo con la evaluación realizada anteriormente, son varios los puntos críticos del método actualmente empleado (SM 3112B), por lo tanto, se recomienda implementar una nueva estrategia de gestión basada en química verde. Así las cosas, la estrategia propuesta estaría basada en la actualización de la norma, implementando por tanto el método EPA 7473, lo que implica la alternativa de compra y adquisición de un nuevo equipo para la medición de mercurio en matrices ambientales, encaminado en la prevención y minimización de los residuos generados, además de que dicha propuesta estaría asociada directamente con la optimización en los procesos analíticos que permitan mejorar la gestión integral de los residuos generados en el laboratorio, evitando formación de sustancias peligrosas o aumento en los residuos, contribuyendo así a la reducción del impacto ambiental que se genera actualmente con el método analítico empleado por el caso de estudio.

En la Tabla 7 se presenta una comparación entre el método de análisis actualmente empleado (3112B) y la alternativa propuesta (basada en la norma EPA 7473).

Tabla 7. Matriz viabilidad técnica y ambiental método actual y propuesto laboratorio caso de estudio

Criterio	Método actual (SM 3112B)	Método propuesto (EPA 7473)
Equipo	BUCK SCIENTIFIC 410 Mercury Analyzer	DMA-80
Tipo de muestra	Líquidos y sólidos	Líquido, sólido y gas
Principio	Digestión ácida con permanganato de potasio, con posterior reducción y absorción atómica	Descomposición térmica de la muestra, amalgamación y absorción atómica.
Tamaño de la muestra	1,5 g	0,5 g
Límite de detección	0,04 µg de Hg	0,001 ng Hg

Criterio	Método actual (SM 3112B)	Método propuesto (EPA 7473)
Control del inventario	Control parcial del inventario	Sistema de control de inventario más estricto
Pretratamientos de la muestra	Requiere pretratamientos con ácidos inorgánicos tóxicos.	No requiere pretratamiento de las muestras
Uso de reactivo peligrosos	Si	No
Mantenimiento continuo de equipos	Lo requiere, pero no se hace continuamente	Para lograr un proceso continuamente optimo, es importante hacer el mantenimiento del equipo, sin embargo, al ser un equipo nuevo, traería una calibración de fábrica.
Control en la clasificación de residuos	Se realiza parcialmente	Se realizaría en base a un sistema de gestión, de forma estricta y adecuada.
Señalización de espacio para el almacenamiento	Se realiza parcialmente	Se realizaría en base a un sistema de gestión, de forma estricta y adecuada.
Acondicionamiento de espacio de almacenamiento de residuos	Se realiza parcialmente	Se realizaría en base a un sistema de gestión, de forma estricta y adecuada.
Tiempos de análisis	4h	5 min
Consumo energético	Alto consumo energético	Bajo consumo energético
Rentabilidad económica	Se dispone actualmente del equipo, pero el gasto de reactivos para el pretratamiento de la muestra hace que el método no tenga una buena rentabilidad.	Tendría que hacerse una inversión inicial con la adquisición del equipo, pero, en adelante los análisis serían más rápidos y con bajos costos.
Gestión de residuos	Alta generación de residuos (2,18 L) por muestra analizada. Residuos producto de pretratamiento y análisis de muestra, blancos de verificación, y duplicado.	Al miniaturizar y eliminar el pretratamiento de la muestra, se generan menos residuos

criterio	Método actual (SM 3112B)	Método propuesto (EPA 7473)
Huella de carbono	Alta huella de carbono (considerable generación de volúmenes de muestras contaminadas con metales pesados).	Baja huella de carbono (disminución de volúmenes generados contaminados con metales, no requiere pretratamiento de la muestra)
Consumo energético	240V	110-230 V

Con esta comparación se observa que al implementar esta estrategia para mitigar el impacto ambiental que tiene el método en el laboratorio GAIA, se lograría reducir el consumo energético, evitaría el pretratamiento de las muestras, y por su puesto disminuiría la generación de residuos gracias a la miniaturización del tamaño de muestra. Por lo que se analizaría la alternativa de adquirir un equipo (DMA-80 evo) analizador directo de mercurio para muestras sólidas, líquidas y gaseosas. Implica un tiempo de análisis de solo 5 minutos y no requiere la preparación de la muestra. La técnica es muy fácil de utilizar, solo debe pesar la muestra, cargarla en el auto-muesteador incorporado e iniciar el análisis. En el siguiente esquema se observa las mejoras que estarían implementándose al aplicar la estrategia de química verde propuesta en el laboratorio GAIA:



Control del inventario. Es importante realizar un control de los insumos consumibles, puesto que esto implica mayor consumo de materias primas como solventes orgánicos y ácidos fuertes, lo que a su vez esta traducido en la generación de más residuos, esta problemática se ve mitigada con la implementación de este equipo nuevo que tiene la ventaja de no necesitar un pretratamiento de las muestras y este equipo también promueve la miniaturización de dicha muestra.

Modificación de los procesos analíticos. Al ser un nuevo equipo, se tendrán que implementar nuevas metodologías y modificar las ya establecidas y validadas en el laboratorio. Este equipo implementa normas como EPA 7473 (mercurio en sólidos y soluciones por descomposición térmica, amalgamación, y espectrometría de absorción atómica). Además, cumple con los métodos ASTM D-6722-01 (mercurio total en carbón y residuos de combustión en carbón), ASTM D-7623-10 (mercurio total en petróleo crudo) y UOP 938-10 (mercurio total y especies de mercurio en hidrocarburos líquidos).

Administración de residuos. Este equipo cuenta con la ventaja de que necesita muy poca muestra (0,5 mg) para la realización del análisis, además de que no requiere pretratamiento de muestra con reactivos líquidos, es por esto que los residuos generados serán menores que los que se generan actualmente (3 L/por muestra aprox.). Así mismo se propone la gestión de un sistema normativo interno, donde haya una estricta clasificación, manejo y tratamiento de reactivos así como la disposición de los residuos generados separados adecuadamente, lo cual se podría hacer fortaleciendo el sistema de etiquetado con el que se cuenta actualmente, además de la adecuación de espacios adecuados para el almacenamiento de los reactivos y residuos correctamente señalizados con pictogramas, con áreas separadas y condiciones ambientales óptimas. Para realizar un control de la implementación de esta estrategia se propone realizar auditorías internas del cumplimiento de esta propuesta, donde específicamente se haga un análisis de mercurio en los residuos generados con el método, con rangos máximos de concentración de este metal.

4. Conclusiones

La recolección de la información sirvió como punto de partida para la realización del diagnóstico del impacto ambiental generado por el método de interés (determinación de mercurio) en el laboratorio caso de estudio encontrando que se hace un control y manejo de residuos de forma parcial, no se realiza la actualización de la plataforma donde se hace el control de inventario, se determina el uso de reactivos tóxicos y alta generación de volumen de residuos contaminados con metales en el proceso analítico. Por tanto, se hizo necesario proponer la implementación de una estrategia basado en principios de química verde, adquisición de un equipo nuevo y sustitución de método actual (SM3112B) por el propuesto (EPA 7473) con la finalidad de mitigar los impactos en mención. La evaluación del verdor asociado al método analítico (determinación de mercurio en matrices ambientales por absorción atómica), por medio del análisis multicriterio (RGB, TOPSIS, HEXAGON) arrojó información más precisa y completa de los impactos ambientales generados. Aun considerando la simplicidad, del método TOPSIS, además de los resultados de similitud con soluciones ideales, a criterio del autor se eligen los métodos HEXAGON y RGB puesto que ambos complementan una evaluación completa y detallada de criterios (analíticos, ambientales, económicos) y con el método HEXAGON es posible presentar los resultados de una manera simple y vistosa mediante un pictograma.

Finalmente, la estrategia a implementar, método analítico basado en la norma EPA 7473 - Mercurio en sólidos y soluciones por descomposición térmica, amalgamación y espectrofotometría de absorción atómica, implica la alternativa de adquisición de un nuevo equipo para realizar los análisis correspondientes, además el nuevo método influenciaría positivamente en el verdor, disminuiría la huella de carbono que actualmente es ocasionada por la generación de considerables volúmenes de muestras contaminadas con metales pesados, miniaturización de la muestra y eliminación de etapas de pretratamientos de muestra, además del consumo energético y rentabilidad económica.

5. Agradecimientos

Los autores agradecen a Universidad de Antioquia por brindar los recursos y medios para llevar a cabo el desarrollo de la presente investigación.

6. Referencias

- Aenishaenslin, Cécile & Hongoh, Valerie & Cissé, Hassane & Hoen, Anne & Samoura, Karim & Michel, Pascal & Waaub, Jean-Philippe & Bélanger, Denise. (2013). Multi-criteria decision analysis as an innovative approach to managing zoonoses: Results from a study on Lyme disease in Canada. *BMC public health*. 13. 897. 10.1186/1471-2458-13-897.
- Bystrzanowska, M., & Tobiszewski, M. (2020). Chemometrics for Selection, Prediction, and Classification of Sustainable Solutions for Green Chemistry—A Review. *Symmetry*, 12(12), 2055. MDPI AG. <http://dx.doi.org/10.3390/sym12122055>.
- Bystrzanowska, Marta & Petkov, Petko & Tobiszewski, Marek. (2020). Ranking of Heterogeneous Catalysts Metals by Their Greenness. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*. 2019. 10.1021/acssuschemeng.9b04230.
- Cordina, A (2011). Deficiencias en el uso del FODA, causas y sugerencias. *Revista de ciencias estratégicas*. Vol 1. N° 25. Medellin, Colombia.
- DECRETO 1076 (2015). Sector Ambiente y Desarrollo Sostenible.
- Fabjanowicz, Magdalena & Płotka-Wasyłka, Justyna & Namieśnik, Jacek. (2018). Detection, identification and determination of resveratrol in wine. Problems and challenges. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. 103. 10.1016/j.trac.2018.03.006.
- Gaioli, M. et al. (2012). Impacto del mercurio sobre la salud humana y el ambiente. *Arch Argent Pediatr* 2012;110(3):259-264
- Guardia, Garrigues, S., & ProQuest. (2011). Challenges in green analytical chemistry. *RSC Pub*.
- Namieśnik, J. (2001). Green analytical chemistry – Some remarks. , 24(2), 151–153. doi:10.1002/1615-9314(20010201)24:2<151::aid-jssc151>3.0.co;2-4
- Nowak, P. M., Kościelniak, P., Tobiszewski, M., Ballester-Caudet, A., & Campíns-Falcó, P. (2020). Panorama general de los tres enfoques multicriterio aplicados a una evaluación global de los métodos analíticos. doi:10.1016/j.trac.2020.116065.
- Ramirez, Francisco & Afán, Isabel & Davis, Lloyd & Chiaradia, Andre. (2017). Climate impacts on global hot spots of marine biodiversity. *Science Advances*. 3. 10.1126/sciadv.1601198.
- Reyes Cuellar, J. C. (2009). La Química Verde y la problemática de los residuos químicos de los laboratorios. *CIENCIA EN DESARROLLO*, 2(2). <https://doi.org/0121-7488>
- Rodríguez, B. (2019). Enseñanza de la química sostenible en las carreras de ingeniería Teaching sustainable chemistry in engineering careers. *Revista De Química PUCP*, 32(1), 13-17.
- Rutkowska, M; Płotka-Wasyłka, J; et al. (2019). Recent trends in determination of neurotoxins in aquatic environmental samples. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. Volume 112. Pages 112-122. ISSN 0165-9936. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2019.01.001>.
- STANDARD METHODS for the Examination of Water and Wastewater, American Public Health Association, American Water Works Association, Water Environment Federation, 23th Edition (2017). Pág. 2-48, 3-12.
- Subdirección ambiental, área metropolitana de Bucaramanga. (2020). Guía para elaboración y presentación del plan de gestión integral de residuos o desechos peligrosos-PGIRESPEL aplicado a micro generadores (pp. 1-8). Bucaramanga.

- Tobiszewski, M., & Orłowski, A. (2015). Multicriteria decision analysis in ranking of analytical procedures for aldrin determination in water. *Journal of chromatography. A*, 1387, 116–122. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2015.02.009>
- Tobiszewski, Marek & Bystrzanowska, Marta. (2020). Monetary values estimates of solvent emissions. *Green Chemistry*. 22. 7983-7988. 10.1039/D0GC03210G.
- U.S. EPA. (1998). “Método 7473 (SW-846): Mercurio en sólidos y soluciones por descomposición térmica, amalgamación y espectrofotometría de absorción atómica”, Revisión 0. Washington, DC.
- V. Mazzaracchio, A. Sassolini, K.Y. Mitra et al. (2022). A fully-printed electrochemical platform for assisted colorimetric detection of phosphate in saliva: Greenness and whiteness quantification by the AGREE and RGB tools. *Green Analytical Chemistry*, Volume 1, 2022100006, ISSN 2772-5774. <https://doi.org/10.1016/j.greeac.2022.100006>.
- Valencillos, Y. (2021). Química para el medio ambiente proyecto: Investigaciones aplicadas desde el aula de clase para publicaciones. *Revista facultad de ingeniería UVM*, 15 (1).