

## RELATÓRIO CIENTÍFICO

**1. Título do Projeto:** Instituto Nacional de Tecnologias Analíticas Avançadas (INCTAA)

**2. Pesquisador responsável:** Celio Pasquini

**3. Instituição sede do projeto:** Instituto de Química – Universidade Estadual de Campinas

**4. Equipe de pesquisa:** A equipe de pesquisadores do INCTAA e suas respectivas instituições está detalhada no **APÊNDICE I** deste relatório. O instituto conta atualmente com 51 pesquisadores nacionais e 10 pesquisadores colaboradores internacionais efetivos.

**5. Processos:** FAPESP - 2014/50951-4 e CNPq - 465768/2014-8

**6. Período de vigência do projeto:** 01/07/2017 a 30/06/2023.

**7. Período a que se refere este relatório:** 01/julho/2022 – 30/junho/2023

Relatório final

Campinas, 17 de julho de 2023



Prof. Celio Pasquini

Coordenador do INCTAA

## **8. Resumo do projeto:**

O Instituto Nacional de Ciências e Tecnologias Analíticas Avançadas (INCTAA) foi estabelecido em julho de 2009, quando realizou seu primeiro workshop geral e elegeu as linhas e objetivos específicos iniciais que deram início às suas atividades. Sua proposta pressupõe a atuação no sentido de atender as demandas por ciência e tecnologias analíticas emanadas dos mais diversos setores da sociedade tanto público como privado além da sua atuação no desenvolvimento científico fundamental. A composição dos pesquisadores membros do INCTAA reflete a participação de diversos destes setores, o que permite a identificação dos problemas e a elaboração suas soluções, que são transferidas, na maioria das vezes, direta e rapidamente, fornecendo os meios para solucionar problemas analíticos relevantes para o país.

As Ciências e Tecnologias Analíticas constituem uma área multidisciplinar que permeia diversos temas de interesse nacional. O INCTAA apoia a iniciativa de seus membros em atuar em qualquer área multidisciplinar buscando sempre a atuação em rede, envolvendo pesquisadores de duas ou mais instituições. As principais áreas de atuação do INCTAA são:

- **Instrumentação Analítica**
- **Valorização de Produtos Agropecuários**
- **Ambiental**
- **Forense**

### **8.1. Missão:**

O Instituto Nacional de Ciências e Tecnologias Analíticas Avançadas (INCTAA) visa, dentro de uma abordagem contemporânea inter e multidisciplinar, a desencadear ações sinérgicas que levam ao avanço científico e à inovação da tecnologia, da instrumentação e dos métodos analíticos para enfrentar os desafios atuais que se impõem nas mais diversas áreas do conhecimento e de interesse ao desenvolvimento econômico e social do Brasil.

Informações sobre a atuação e resultados alcançados pelo INCTAA podem ser encontradas na homepage do instituto (<https://www.inctaa.org>).

## 9. Realizações no período

Este relatório descreve as principais atividades e resultados alcançados pelos pesquisadores do Instituto Nacional de Ciências e Tecnologias Analíticas Avançadas (INCTAA) no decorrer do período de 01 de junho de 2022 a 30 de junho de 2023. No âmbito geral, ele constitui o **relatório final** de atividades do projeto INCTAA – Fase II.

Este último ano foi marcado pelo retorno às atividades presenciais normais em nível anterior à pandemia da Covid-19. No entanto, observa-se que a produção consolidada do instituto refletiu a redução de atividades no período de dois anos no qual as medidas restritivas ao trabalho presencial foram adotadas.

Assim, embora os pesquisadores do INCTAA tenham se esforçado para manter o nível mínimo de atividades e de geração de resultados, estas não puderam atingir os patamares anteriores à pandemia.

Este relatório adota a **formatação solicitada pela FAPESP**: (<https://fapesp.br/14194/formato-para-os-relatorios-cientificos-anuais-e-final-auxilio-a-pesquisa-projeto-tematico>).

O detalhamento sobre as atividades desenvolvidas pelos pesquisadores do INCTAA e seus resultados foram incluídos como **APÊNDICES** a este relatório. Nestes apêndices podem ser também encontradas as informações sobre o desenvolvimento em rede dos temas de pesquisa e sobre as contribuições dos pesquisadores do INCTAA neles envolvidos.

Em termos numéricos, os pesquisadores do INCTAA produziram no período 44 artigos publicados em revistas indexadas. Além dos artigos publicados os pesquisadores do INCTAA apresentaram 24 trabalhos em congressos internacionais, 48 e congressos nacionais. Tiveram 5 patentes concedida ou solicitadas. Produziram 2 capítulos de livros, publicaram 1 livro e promoveram 7 eventos científicos.

Na formação de pessoal, os pesquisadores do INCTAA orientaram 12 mestrados e 11 doutorados, defendidos no período a que se refere este relatório.

O INCTAA realizou durante o 20º. Encontro Nacional de Química Analítica (ENQA) que ocorreu em Bento Gonçalves entre os dias 25 e 28 de setembro de 2022 o seu **IV Workshop Geral de Acompanhamento** visando estabelecer as diretrizes para seus pesquisadores no período restante de vigência do projeto junto à FAPESP e ao CNPq. O Workshop ocorreu no dia 25 e contou com a presença de pesquisadores convidados internacionais e proporcionou um ambiente de retomada das discussões presenciais interrompidas no período da Covid-19. No total, o workshop contou com a participação de 90 pessoas entre pesquisadores e alunos de pós-graduação. O programa do workshop foi (em Inglês, conforme solicitado pelos organizadores do 20. ENQA:

Title of the Workshop: Advances, Perspectives and Research Opportunities at the National Institute of Advanced Analytical Science and Technology (INCTAA)

Coordinator: Celio Pasquini / UNICAMP – Brazil

14:00 – 14:05 h Opening – Celio Pasquini (UNICAMP, Brazil)

14:05 – 14:30 h José Manuel Amigo (Department of Analytical Chemistry,UPV- EHU, Spain) – The role of Chemometrics in the near future. Is there a future?

14:30 – 14:50 h Wilson Figueiredo Jardim (Retired from UNICAMP, Brazil) - Impressions of a former INCTAA researcher.

14:50 – 15:10 h Marco Tadeu Grassi (UFPR) – Environmental research at the INCTAA

15:10 – 15:30 h Maria da Conceição B. S. de Mendonça Montenegro (Universidade do Porto, Portugal) – Polymeric membranes: Analytical applications

15:30 – 16:00 h Research opportunities in the INCTAA and final discussion.

Os avanços mais relevantes associados à missão do INCTAA no período são apresentados a seguir.

## ***9.1. Atividades desenvolvidas e resultados obtidos no âmbito da temática ambiental, voltadas para os projetos de água de reuso, contaminantes emergentes e microplásticos.***

### ***9.1.1. Água de reuso***

O período a que se refere este relatório marcou o término das atividades dos pesquisadores do INCTAA em colaboração com a SANASA – Campinas sobre a temática relacionada à água de reuso.

A geração de água potável a partir de efluentes tratados em estações de tratamento de esgoto é uma realidade em muitos países e pode ser uma fonte importante de água potável. A estação pioneira de produção de água de reuso indireto foi a de Montebello Forebay, nos Estados Unidos, na década de 60 e a de reuso potável direto de Windhoek na Namíbia em 19693. O reuso potável indireto foi desenvolvido a partir de águas superficiais e subterrâneas, com o uso de diferentes tecnologias (colunas de carvão ativado, processos oxidativos avançados (UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> e O<sub>3</sub>), filtração em membranas, entre outras). Enquanto, o reuso potável direto vêm crescendo devido ao apoio de organizações como o Conselho Nacional de Pesquisa Americano. Espera-se que o reuso potável cresça cada vez mais devido ao aumento da população e, a consequente, pressão sobre os recursos finitos de água. Hespagnol afirma que o reuso potável direto é necessário para garantir o abastecimento em áreas submetidas a estresse hídrico<sup>1</sup>.

Para que a água gerada pelo processo possa ser de uso potável precisa ter a sua qualidade garantida para essa finalidade. Os principais compostos químicos inorgânicos, orgânicos, agrotóxicos e metabólitos que representam risco à saúde estão apresentados na Portaria GM/MS Nº 888 de 4 de maio de 2021<sup>12</sup>.

A presença de contaminantes emergentes (CE) em ambientes aquáticos tem gerado muita preocupação. Esses compostos orgânicos, uma vez no ambiente, atingem o meio aquático, oferecendo riscos para espécies não-alvo, por sua toxicidade, pela possibilidade de bioacumulação ao longo da cadeia alimentar e por seus efeitos ecotoxicológicos ainda pouco conhecidos em longo prazo. Os fármacos e os agrotóxicos são duas classes de compostos consideradas importantes CE uma vez que são

utilizados em larga escala. No caso dos fármacos destacam-se os antimicrobianos, os antiparasitários e os antidepressivos.

O INCTAA dentro do seu quadro de pesquisadores possui expertises em diversas áreas associadas a Química Ambiental e ao desenvolvimento de métodos instrumental de análise. Possui um amplo parque instrumental sediado nas principais universidades paulistas, disponíveis para serem empregados nos diferentes estudos que contribuíram para o sucesso do projeto proposto. Vários estudos que foram realizados ao longo de anos pelos pesquisadores do INCTAA, antes mesmo do estabelecimento da cooperação entre a SANASA e o INCTAA, trouxeram um conhecimento técnico-científico que contribuíram para que os principais objetivos deste projeto fossem rapidamente alcançados. Destaca-se o desenvolvimento e validação de métodos analíticos para a determinação de contaminantes de preocupação emergente empregando a cromatografia líquida associada a espectrometria de massas sequencial em diferentes matrizes ambientais e emprego destes métodos em estudos de mobilidade de fármacos e agrotóxicos no ambiente, monitoramento dos compostos em ETE e águas superficiais, degradação de contaminantes por processos oxidativos avançados, estudos de adsorção em materiais adsorventes, entre outros.

Assim, o estabelecimento desta cooperação permitiu avançar ainda mais na direção da produção de água de reuso potável que pode futuramente se concretizar em ganhos incontestáveis para a sociedade devido a redução dos recursos hídricos e para o meio ambiente reduzindo a contaminação dos corpos aquáticos.

As principais metas atingidas compreenderam:

- (i) Priorização de contaminantes emergentes (fármacos de uso humano, edulcorantes e agrotóxicos) a serem monitorados em efluentes de diferentes ETE da cidade de Campinas, SP, baseados em dados de consumo, incluindo a EPAR Capivari II;
- (ii) Desenvolvimento e validação de métodos analíticos para a determinação de contaminantes de preocupação emergente priorizados em (i) a nível de ng/L usando a cromatografia líquida bidimensional associada a espectrometria de massas sequencial ou cromatografia líquida associada a espectrometria de massas sequencial com concentração prévia em cartuchos de extração em fase sólida;
- (iii) Avaliação da presença dos CE selecionados nos afluentes e efluentes das ETE e águas superficiais e selecionar possíveis compostos marcadores que pudessem servir para prever a qualidade do efluente polido na Estação Piloto;
- (iv) Avaliação dos diferentes processos da Estação Piloto (osmose reversa, peróxido de hidrogênio, UV, e carvão ativado) de forma individual ou em combinação na remoção de compostos provenientes do efluente da EPAR e que, por ser recalcitrantes para o processo de tratamento do esgoto, poderiam ser empregados como marcadores de qualidade da água potável de reuso; e
- (v) Seleção da melhor combinação de processos de polimento do efluente da EPAR e avaliar a qualidade do efluente tratado pelo processo selecionado mediante análise da água segundo a Portaria GM/MS Nº 888 de 4 de maio de 2021, incluindo ensaios de

atividades antimicrobiana, atividade biológica, presença de vírus, bactérias e protozoários e ensaios toxicológicos.

Participantes do projeto:

Pesquisadores Principais:

Profa. Dra. Susanne Rath (Unicamp)

Prof. Dr. Jarbas J.R. Rohwedder (Unicamp)

Prof. Dr. Pedro S. Fadini (UFSCar)

Prof. Dr. Davi Gasparini Fernandes Cunha (USP- São Carlos)

Profa. Dra. Cassiana C.M. Raimundo (Unicamp)

Prof. Dr. José Roberto Guimarães (Unicamp)

Prof. Dr. Álvaro Santos Neto (USP-São Carlos)

Prof. Dr. José Carlos Mierzwa (CIRRA, Escola Politécnica USP)

Eng. Renato Rossetto (SANASA)

Enga. Renata Gasperi (SANASA)

Enga. Silvia Dias (SANASA)

Alunos:

Msc. Vinicius Diniz (Unicamp)

Dra. Jéssyca Ferreira de Medeiros (Unicamp)

Dr. Josilei Silva de Ferreira (UFSCar)

Dr. Caio Augusto Alexandre Rodrigues da Silva (Unicamp)

Dr. Rafael Porto (Unicamp)

Dra. Natalia Tetzner (Unicamp)

Dr. Alyson Rogério Ribeiro (Unicamp)

Msc. Rhannanda Pivetta (Unicamp)

Msc. Andreza Camilotti Dionisio (Unicamp)

Msc. Maria Fernanda Araujo Vieira Matos (Unicamp)

Msc. Miraldo Santa Rosa dos Santos

Priscilla da Costa Cunha Alves (Unicamp)

Eduardo da Silva Machado (Unicamp)

Pesquisadores Convidados:

Profa. Dra. Maria Tereza Pepe Razzolini (Faculdade de Saúde Pública da USP-SP)

Profa. Dra. Silvia Figueiredo Costa (Instituto de Medicina Tropical, USP-SP)

Dra. Ligia Maria Salvo Morales (CIRRA, Escola Politécnica USP)

Dr. Nazzareno Scaccia (Faculdade de Saúde Pública da USP-SP)

Suporte Técnico:

Márcio Romeiro (INVICT)

O projeto INCTAA-SANASA desenvolvido para avaliar a potencialidade de gerar água de reúso potável a partir do efluente de esgoto doméstico reuniu um grupo de pesquisadores da SANASA e de diversas instituições de ensino superior.

A expertise deste grupo permitiu uma abordagem ampla em um assunto complexo e muito desafiador. Foi desenvolvido um número significativo de métodos analíticos para a determinação de contaminantes de preocupação emergente usando tecnologias no estado da arte que foram essenciais para sua aplicação na definição de possíveis marcadores da qualidade do efluente tratado e monitoramento nos estudos de ocorrência e remoção de compostos de contaminação emergentes em ETE que empregam diferentes processos de tratamento.

Todo esse conhecimento foi essencial para os estudos conduzidos na EPAR Capivari visando avaliar a possibilidade de gerar água de reúso potável. Inúmeros estudos foram realizados para entender a qualidade do efluente pós-MBR que é um diferencial importante quando comparado as outras estações avaliadas neste trabalho. Ficou evidente que o efluente tratado por bioreatores de membranas é de alta qualidade e é fundamental para viabilizar a produção de água de reúso potável. Todos os resultados obtidos ao longo dos estudos realizados corroboram essa afirmação.

Em 2016 foi realizado um estudo na Estação Piloto da EPAR por pesquisadores do CIRRA no qual se concluiu que o melhor arranjo de tratamento, considerando-se os parâmetros de qualidade avaliados, era aquele que combinava os processos de osmose reversa e oxidação fotoquímica e desinfecção. Mesmo com esses resultados, enfatizou-se a necessidade da realização de um estudo de maior duração, considerando-se o arranjo definido, além de avaliar a eficiência do mesmo em relação à remoção de contaminantes específicos, principalmente fármacos e outros produtos químicos orgânicos, com potencial de estarem presentes nos esgotos.

Em base a essas informações foi realizado um trabalho de priorização de contaminantes emergentes (fármacos, edulcorantes e agrotóxicos) para selecionar possíveis marcadores que pudessem atestar a qualidade do efluente tratado pelo processos da Estação Piloto. Como moléculas marcadoras representantes de insumo farmacêuticos



ativos indica-se a sucralose, hidroclorotiazida, carbamazepina e albendazol e do grupo de agrotóxicos a atrazina. Com essas moléculas foi possível observar a necessidade de acrescentar o uso do carvão ativo no arranjo OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> para uma remoção eficiente de contaminantes orgânicos. Sendo assim, os estudos conduzidos na Estação Piloto da EPAR foram conduzidos majoritariamente com o arranjo OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA. A caracterização e estudos de sorção no carvão instalado na Estação Piloto comprovaram a sua alta eficiência na remoção de compostos orgânicos, assim como a possibilidade da regeneração do carvão da coluna.

Para verificar a potabilidade da água de reuso foram monitorados os compostos que compõe a Portaria GM/MS Nº 888 de 4 de maio de 2021 e os valores máximos permitidos nesta. Foram verificados que os padrões organoléptico de potabilidade, substâncias químicas inorgânicas e orgânicas, agrotóxicos e metabólitos e subprodutos da desinfecção que apresentam riscos à saúde foram todos atendidos no efluente tratado pelos processos OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA. Em adição, o processo foi capaz de remover bactérias heterotróficas, coliformes totais, E. coli e pseudomonas aeruginosa que ainda estavam presentes no efluente pós-MBR. Para os protozoários monitorados (Cryptosporidium sp e a Giardia) os resultados não foram conclusivos e carecem de estudos adicionais. No que concerne a remoção de atividade biológica, estudos in vitro e in vivo, os resultados preliminares foram promissores, no entanto, também requerem estudos adicionais.

De maneira geral, os resultados obtidos neste projeto indicam a concreta possibilidade da geração de água potável do esgoto tratado na EPAR e usando o processo combinado OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA. Como marcadores para avaliar o bom funcionamento dos processos da Estação Piloto indica-se o monitoramento da condutividade, cor aparente, dureza, DQO, concentração de cloreto, cálcio, sulfato, sódio, sucralose, hidroclorotiazida, carbamazepina, albendazol e atrazina. Para confirmar essa proposta, sugere-se que estes marcadores sejam monitorados por um maior período abrangendo as diferentes estações do ano. Cabe ressaltar, que os marcadores da classe dos contaminantes emergentes podem variar, pois estes dependem do perfil de consumo da população.

Como etapas futuras seria interessante considerar a continuidade dos estudos envolvendo a avaliação de bactérias, protozoários, vírus, ensaios de toxicidade, e produtos de desinfecção, após processo de cloração do efluente tratado.

O **APÊNDICE II** detalha as atividades desenvolvidas no período referente a este relatório.

O relatório final detalhado das atividades desenvolvidas e dos excelentes resultados alcançados no âmbito deste projeto de cooperação pode ser encontrado no site do INCTAA no endereço:

[https://www.inctaa.org/files/ugd/7b4a56\\_fca1942c9c904f1b80e0fb564a449ea0.pdf](https://www.inctaa.org/files/ugd/7b4a56_fca1942c9c904f1b80e0fb564a449ea0.pdf)

Este relatório foi apresentado no **Workshop INCTAA-SANASA de Encerramento do Projeto** realizado em 30 de junho de 2023 no Instituto de Química da UNICAMP.



### **9.1.2. Contaminantes emergentes e microplásticos**

Os pesquisadores do INCTAA desenvolvem estudos associados a ocorrência de compostos emergentes e microplásticos em amostras ambientais e seus efeitos no meio ambiente.

A proposta consiste na realização de um trabalho de avaliação de contaminantes emergentes (CE) e microplásticos (MP) em águas superficiais e em material particulado na atmosfera. No que diz respeito às águas superficiais, está sendo avaliada a presença destes contaminantes nas localidades onde cada pesquisador atua, caracterizando a necessidade de colaboração em rede, avaliando seu impacto ao ecossistema, devido às pressões antrópicas sofridas por estes ambientes.

Objetiva-se investigar a contaminação originária de plásticos de corpos aquáticos com diferentes cenários de contaminação: Rios Guaíba, Monjolinho, Jundiá, Tietê, Paraíba do Sul, Barigui e Iguaçu, Lago Paranoá e Lagoa da Pampulha. Foi realizada a otimização do processo de digestão para a extração dos MP em águas, a fim de verificar se esses sofrem modificações morfológicas e estruturais durante esta etapa do protocolo. Foram realizadas campanhas de amostragem nas 4 estações do ano, abrangendo coletas sazonais, em períodos de estiagem e de maior precipitação. Com os resultados gerados, pretende-se fazer um site com banco de dados aberto com interface para aumento do acervo de informações a partir de usuários externos. Processos de sorção de contaminantes (como HPA, fármacos, hormônios) em MP e o desenvolvimento de processos de remediação também serão realizados.

O grupo de pesquisadores do INCTAA e seus alunos que se dedicam ao desenvolvimento da temática de Microplásticos no Meio Ambiente realizou um Workshop na cidade de Campinas no período de 20 a 22 de maio de 2023. O evento contou com um total de 40 participantes.

O **APÊNDICE III** deste relatório detalha as atividades desenvolvidas pelos pesquisadores do INCTAA dentro da temática do estudo dos compostos emergentes e microplásticos em amostras ambientais.

## **9.2. Atividades desenvolvidas e resultados obtidos no âmbito da temática da estimativa do consumo de drogas ilícitas em cidades brasileiras via análise de esgoto.**

A produção e consumo de drogas de abuso impactam a sociedade em termos de saúde, educação e segurança pública. De modo a subsidiar políticas públicas sobre drogas, dados de sensores, entrevistas, apreensões de drogas e internações clínicas têm sido usados para inventariar a presença das drogas nas cidades, bem como seus padrões de consumo.

É nesse cenário que a Epidemiologia baseada no Esgoto se apresenta como uma estratégia complementar para estimar a presença de drogas em cidades. Baseia-se na identificação e quantificação de substâncias químicas resultantes do consumo e/ou manipulação de drogas em amostras de esgotos produzidos por uma comunidade. Tais

biomarcadores possuem relação direta com a exposição de pessoas a diferentes tipos de drogas

A partir de amostras de esgoto bruto, coletadas na entrada de estações de tratamento de esgotos (ETE), são executadas diferentes etapas buscando isolar biomarcadores de interesse e quantificá-los por meio de instrumentação analítica apropriada. Assim, os resultados produzidos na análise química, juntamente com dados acessórios relacionados à quantidade de esgoto produzida por uma população, permitem estimar o consumo de drogas de modo empírico e não intrusivo, preservando o anonimato de indivíduos.

O Projeto Estimativa do Consumo de Drogas Ilícitas em Cidades Brasileiras via Análise de Esgotos, apoiado pela SENAPRED/Ministério da Cidadania, busca ampliar os estudos de Epidemiologia Baseada no Esgoto para diferentes regiões do Brasil por meio do estabelecimento de uma rede de pesquisadores e colaboradores.

No período referente a este relatório o projeto foi desenvolvido de forma a produzir o primeiro Boletim de Acompanhamento o qual relata os principais resultados obtidos até o momento. Este 1º. boletim está incluído no **APÊNDICE IV** deste relatório relata com maior detalhe as atividades desenvolvidas, bem como demonstra o envolvimento e a atuação em rede dos pesquisadores do INCTAA.

### ***9.3. Atividades desenvolvidas no âmbito da temática de métodos analíticos sensíveis baseados em nanopartículas.***

Esta linha de pesquisa desenvolvida pelos pesquisadores do INCTAA tem como objetivo produzir métodos baseados em QDs (quantum dots) nanoestruturados para detecção amplificada (SEIRA) de biomoléculas; desenvolver fases sólidas acondicionadas com QDs como sensores óticos e estudar modificações de superfície mais sensíveis; sintetizar, caracterizar e aplicar material contendo MOF Ln-MOF@grafeno, produzindo cartuchos, para remediar metais pesados, fármacos e agrotóxicos em águas.

No período, foram sintetizados materiais nanoestruturados de prata (nanopartículas de prata e quantum dots de seleneto de prata), estabilizadas com diferentes reagentes, tais como ácido 3-mercaptopropiônico, Polivinilpirrolidona (PVP) e Álcool polivinílico (PVA). Além dessas, também foram sintetizados quantum dots de seleneto de cobre estabilizados com ácido mercaptosuccínico.

Tais materiais foram empregados em experimentos preliminares com LIBS, SERS e SEIRA mostrando resultados bastante promissores.

Maiores detalhes sobre os resultados obtidos e atuação dos pesquisadores do INCTAA que desenvolvem esta linha de pesquisas podem ser encontrados no **APÊNDICE V** deste relatório.

### ***9.4. Atividades desenvolvidas no âmbito da temática de valorização de produtos agropecuários***

A linha de Valorização de Produtos Agropecuários permite uma atividade ampla da rede, articulada por um número significativo de pesquisadores do INCTAA pois inclui pesquisadores atuando em unidades da EMBRAPA e em unidades de ensino e pesquisa. A Rede EMBRAPA de Espectroscopia no Infravermelho Próximo, cuja coordenadora é também pesquisadora do INCTAA, constitui outra frente deste tema de pesquisa que tem propiciado uma forte interação entre os pesquisadores da rede, com ações voltadas a formação de técnicos e pesquisadores aptos a operar de forma adequada os equipamentos e com conhecimentos quimiométricos para explorar os dados obtidos.

A implantação da rede NIR da EMBRAPA foi uma das realizações mais relevantes da atuação dos pesquisadores do INCTAA. Durante dois anos de execução do projeto, 21 unidades da EMBRAPA foram equipadas com a infraestrutura e conhecimento necessários para atuação nesta área que encontra ampla aplicação em um dos setores mais relevantes da economia brasileira.

Dentre as atividades desenvolvidas no período a que se refere este relatório destaca-se o desenvolvimento de método baseado em instrumento NIR portátil para diagnóstico de infecção por *Haemonchus contortus* em ovinos.

*Haemonchus contortus* é o nematódeo gastrintestinal (NGI) de maior prevalência e importância em pequenos ruminantes, por reduzir os valores de volume globular (VG), causando anemia. O diagnóstico precoce da infecção por NGI pode ser utilizado para o tratamento seletivo direcionado (TST) de ovinos, reduzindo o uso de antiparasitários e a resistência anti-helmíntica. Estudos anteriores (Santos et al., 2023) realizados na Embrapa demonstraram a viabilidade do desenvolvimento de modelos empregando equipamento portátil por espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS) para predição do VG e também diagnóstico da infecção dos ovinos por NGI. No entanto, o estudo foi limitado a uma única raça (Morada Nova), para borregos em crescimento. Também não foram estudadas as alterações ocorridas no sangue em resposta às infecções sofridas pelos animais, que por sua vez estão associadas às variações que podem ser observadas pela espectroscopia NIR e fundamentam os modelos. Assim, o objetivo principal das atividades realizadas foi de ampliar os modelos de calibração NIRS para predição de VG e diagnóstico da infecção de ovinos de várias raças e idades, criados a pasto, a partir da análise multivariada de dados coletados diretamente no sangue. Também serão estudadas as associações entre os parâmetros do hemograma com as informações contidas nos espectros com o objetivo de avaliar a capacidade de diagnóstico e de prognóstico da espectroscopia NIR. A transferência de modelo entre equipamentos de diferentes fabricantes também será avaliada, como estratégia de difundir os modelos gerados. Espera-se obter modelos robustos que possam ser usados à campo, favorecendo o TST de ovinos. Os trabalhos experimentais estão em execução na Embrapa Pecuária Sudeste, onde estão em avaliação animais infectados tanto de maneira artificial quanto naturalmente. A avaliação dos dados obtidos bem como a modelagem estão sendo executadas e supervisionadas pela equipe do projeto, que envolve integrantes do INCTAA pertencentes a três unidades da Embrapa (Embrapa Pecuária Sudeste, em São Carlos, SP; Embrapa Milho e Sorgo, Sete Lagoas, MG e Embrapa Algodão, Campina Grande, PB) e a Universidade Federal de Pernambuco (Recife, PE).

Além destes estudos, a EMBRAPA Pecuária Sudeste situada em São Carlos – SP, desenvolveu estudos visando a otimização da produção de leite por meio do controle da alimentação dos animais produtores e baseada na obtenção de informações individualizadas, relacionadas à produção, consumo e características sanitárias do rebanho.

Vacas de alta produção de leite requerem um rígido controle da alimentação, que inclui ração e sais minerais, pois podem ocorrer doenças metabólicas, como a chamada “doença da vaca gorda”, hipocalcemia puerperal e cetose, que podem causar a morte em função de desbalanço nutricional. Essas doenças podem ser diagnosticadas a partir da coleta de amostras de sangue e, de forma menos invasiva, da saliva das vacas. Esse fluido biológico é constituído por componentes orgânicos e inorgânicos que são potenciais indicadores do estado nutricional e eventual desordem bioquímica. A análise de saliva é estratégica, pela facilidade de obtenção e manipulação, e estudos demonstram que resultados semelhantes foram obtidos em comparação à análise de outros fluidos biológicos como plasma, sangue e soro sanguíneo. Embora os componentes inorgânicos sejam encontrados em baixas concentrações, usualmente inferiores ao determinado no plasma, sua associação com concentrações sanguíneas é relatada na literatura. Como fluido de diagnóstico em humanos, a saliva tem ganhado espaço nas pesquisas translacionais. Trabalhos anteriores do grupo proponente indicaram correlação positiva entre alguns constituintes inorgânicos e o diagnóstico de esquizofrenia, explorando análise de componentes principais (PCA) e mapas auto-organizáveis (SOM), abordagens não supervisionadas capazes de produzir visualizações em baixas dimensões a partir de dados de alta dimensão (J Trace Elem Med Biol, 66(2021)126743). Foi também desenvolvida uma alternativa analítica para a detecção precoce de disfunções renais, via fotometria por imagens digitais (Microchem. J, 162(2021)105862). Este projeto objetiva obter informações importantes relacionadas às características fisiológicas e sanitárias do rebanho, a partir das concentrações de constituintes inorgânicos (ex. Ca, Mg, P, K, Fe, Cu, Mn, Zn, V, Co, Cr, As, Mo, Ni, Se e S), além de alguns marcadores orgânicos em amostras de sangue e especialmente de saliva coletadas das vacas em lactação. O trabalho está sendo conduzido na Embrapa Pecuária Sudeste, sendo as amostras analisadas na Embrapa Pecuária Sudeste, UFSCar, UFPR e CENA/USP. Ferramentas de inteligência artificial baseadas em redes neurais serão aplicadas para discriminar, avaliar e identificar padrões relacionados à composição inorgânica dos fluidos, fatores clínicos e biológicos. Os dados serão analisados pelo grupo colaborador da UFPR e por bolsistas DTI-A.

As atividades desenvolvidas sob este tema, a rede de pesquisadores do INCTAA envolvidos e suas atribuições são detalhadas no **APÊNDICE VI e VII**.

### ***9.5. Atividades desenvolvidas no âmbito da temática instrumentação***

O tema instrumentação voltada para a área da Química Analítica constitui um diferencial de atuação do INCTAA tendo gerado artigos e patentes desde o início das atividades do instituto em 2009. No período deste relatório, o tema foi contemplado com as seguintes realizações:

### **9.5.1. Recuperação do espectrofotômetro THz no domínio do tempo (THz-TD).**

Este espectrofotômetro foi adquirido com recursos de um projeto temático financiado pela FAPESP anterior ao projeto INCTAA. O espectrofotômetro foi incorporado ao acervo instrumental do instituto e serviu para o desenvolvimento de diversos projetos voltados para o uso da espectroscopia THz-TD na solução de problemas analíticos.

Depois de alguns anos de operação o laser de bombeamento dos lasers de fs de Ti:Safira se deteriorou e a perda de potência resultante inviabilizou a operação do espectrofotômetro THz-TD.

Durante o período foi adquirido com recursos do projeto INCTAA um novo laser de bombeamento que substituiu o laser defeituoso. Desta forma, o espectrofotômetro THz-TD encontra-se novamente em operação e está disponibilizado, como anteriormente, para usuários do INCTAA e externos. Toda a operação de recuperação do espectrofotômetro foi conduzida pelo pesquisador do INCTAA Prof. Jarbas José Rodrigues Rohwedder do Instituto de Química da UNICAMP, sede do INCTAA e local onde o espectrofotômetro está alocado.

Desta forma, trabalhos como o recentemente publicado por pesquisador do INCTAA empregando a técnica THz-TD poderão continuar a serem desenvolvidos: Silva, I.J.G.; Raimundo Jr., I.M.; Mizaikoff, B. Analysis of Sugars and Sweeteners via Terahertz Time-Domain Spectroscopy, *Analytical Methods*, 14 (2022), 2657-2664. DOI: 10.1039/D2AY00377E

### **9.5.2. Desenvolvimento de novo espectrofotômetro de emissão infravermelho.**

Um novo modelo de espectrofotômetro infravermelho de emissão termicamente induzida operando na faixa de 2000 – 6000 nm e baseado em transformada de Fourier foi construído e preliminarmente avaliado em estudos cinéticos de degradação térmica de polímeros e medicamentos.

Os resultados preliminares mostram o bom desempenho do instrumento e que ele pode simultaneamente monitorar a degradação térmica de produtos como polímeros e medicamentos e acompanhar alterações químicas por eles experimentadas durante o processo de degradação. Os resultados experimentais estão sendo avaliados para interpretar estas modificações químicas.

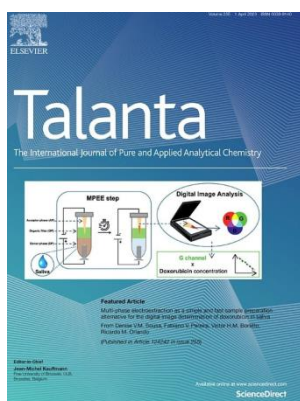
### **9.5.3. Desenvolvimento de sistema simples e rápido de eletro-extração multifase de preparação de amostras para determinação de doxorrubicina em saliva.**

O monitoramento de quimioterápicos em fluidos biológicos é, em muitos casos, de extrema importância para ajuste, a manutenção das terapias e o controle dos efeitos colaterais. Neste trabalho, um método para determinar a doxorrubicina na saliva por análise de imagem digital (DIA) foi otimizada e validada. Imagens de uma ponteira de papel foram obtidos usando um scanner de mesa convencional e barato com uma resolução de 600 ppp. Os canais de dados RGB foram obtidos das imagens em uma

região de 15 x 15 pixels ao redor do vértice do sorvente. Uma ponteira de papel foi usada como material sorvente na preparação de amostras usando um sistema de eletroextração multifásica. Seguindo a otimização usando um design experimental Doehlert, o método foi capaz de extrair simultaneamente 66 amostras em 20 min. O a alta seletividade do campo elétrico associada à capacidade de sorção do material celulósico permitiu a droga quimioterápica a ser pré-concentrada e quantificada em uma faixa entre 50 e 500  $\mu\text{g L}^{-1}$  ( $R^2 > 0,98$ ). O método também exibiu parâmetros adequados (limites de detecção e quantificação, recuperação e precisão) indicando seu potencial para aplicação no monitoramento de doxorubicina e drogas similares na saliva.

O trabalho publicado resultante do desenvolvimento deste sistema foi destacado como capa do periódico Talanta:

Sousa, D. V. M.; Pereira, F. V.; Boratto, V. H. M.; Orlando, R. M. Multiphase electroextraction as a simple and fast sample preparation alternative for the digital image determination of doxorubicin in saliva. *Talanta*, 255 (2023) 1-6. DOI: 10.1016/j.talanta.2022.124242



O detalhamento das atividades desenvolvidas na temática de instrumentação analítica pode ser observado no **APÊNDICE VIII**.

## 9.6. Atividades desenvolvidas referentes ao projeto sobre derramamento de óleo

O Instituto Nacional de Ciência e Tecnologias Analíticas Avançadas (INCTAA) com base em sua missão, na expertise do seu quadro de pesquisadores e na sua abrangência nacional, que inclui estados afetados pelo derramamento de petróleo, se propôs atuar junto ao Programa Ciência do Mar atendendo a chamada emergencial em reposta ao derramamento de óleo que atingiu as praias brasileiras em diversas localidades no ano de 2019. As ações empreendidas pelo INCTAA se voltaram para aspectos relevantes para a compreensão dos impactos causados pelo derramamento e para o desenvolvimento de técnicas analíticas que possam auxiliar na tomada de decisão em futuros eventos:



Segurança Alimentar: Avaliação e monitoramento do impacto da contaminação por HPA, BTX e metais pesados de produtos provenientes da pesca e aquicultura

Balneabilidade e impactos na saúde da população: Avaliação e monitoramento da qualidade da água e sedimentos por contaminação por HPA e BTX

Controle e remediação: Modelagem, sensoriamento remoto e detecção preventiva de acidentes com transporte de óleo e combustíveis. Desenvolvimento de metodologias analíticas para detecção de hidrocarbonetos em águas in situ e praias. Construção de uma biblioteca multi-espectral de petróleos comercializados ou produzidos no Brasil.

O desenvolvimento destas atividades sofreu impacto significativo das restrições impostas pela pandemia da Covid-19 afetando seu cronograma original, e tornando algumas ações associadas aos itens 1 e 2 extemporâneas em relação ao aspecto emergencial coincidente com a fase mais aguda do evento. Mesmo assim, os resultados obtidos permitem avaliar parcialmente a situação da segurança alimentar e balneabilidade em locais afetados pelo derramamento.

O INCTAA produziu no âmbito desta chamada diversos métodos analíticos úteis no monitoramento de ambientes marinhos sujeitos a episódios de derramamento de combustíveis e petróleo que contribuem para prevenção, detecção e tomada de decisões de enfrentamento a eventos com as mesmas características daquele ocorrido no ano de 2019.

Os pesquisadores do INCTAA e suas instituições que participaram do desenvolvimento destas atividades são:

**Ceará:**

Lívia Paulia Dias Ribeiro	UNILAB	Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira
---------------------------	--------	---

Gisele Simone Lopes	UFC	Universidade Federal do Ceará
---------------------	-----	-------------------------------

Wladiana Oliveira Mato	UFC	Universidade Federal do Ceará
------------------------	-----	-------------------------------

**Paraíba:**

Mario César Ugulino de Araújo	UFPB	Universidade Federal da Paraíba
-------------------------------	------	---------------------------------

Katia Messias Bichinho	UFPB	Universidade Federal da Paraíba
------------------------	------	---------------------------------

**Pernambuco:**

Claudete Fernandes Pereira	UFPE	Universidade Federal do Pernambuco
----------------------------	------	------------------------------------

Fernanda Araújo Honorato	UFPE	Universidade Federal do Pernambuco
--------------------------	------	------------------------------------

Maria Fernanda Pimentel	UFPE	Universidade Federal de Pernambuco
-------------------------	------	------------------------------------

Ana Paula Silveira Paim	UFPE	Universidade Federal do Pernambuco
-------------------------	------	------------------------------------

Ricardo Saldanha Honorato	PF-PE	Departamento de Polícia Federal
---------------------------	-------	---------------------------------



Rio de Janeiro:

Maria Cristina Canela	UENF	Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro
-----------------------	------	--

**Paraná:**

Marco Tadeu Grassi	UFPR	Universidade Federal do Paraná
Gilberto Abate	UFPR	Universidade Federal do Paraná

**São Paulo:**

Celio Pasquini	UNICAMP	Universidade Estadual de Campinas
Ivo Milton Raimundo Junior	UNICAMP	Universidade Estadual de Campinas
Jarbas Jose Rodrigues Rohwedder	UNICAMP	Universidade Estadual de Campinas
Pedro Sergio Fadini	UFSCar	Universidade Federal de São Carlos
Joaquim Araújo Nóbrega	UFSCar	Universidade Federal de São Carlos
Susanne Rath	UNICAMP	Universidade Estadual de Campinas
Fábio Rodrigo Piovezani Rocha	USP – CENA	Universidade de São Paulo
Ana Rita de Araújo Nogueira	EMBRAPA Pecuária	Sudeste-SP

O relatório contendo a descrição detalhada dos resultados alcançados pela execução do projeto pode ser encontrado na página do INCTAA na web, no endereço:

[https://www.inctaa.org/\\_files/ugd/7b4a56\\_ae973db13a2145f98fcf9015e579f311.pdf](https://www.inctaa.org/_files/ugd/7b4a56_ae973db13a2145f98fcf9015e579f311.pdf)

### **9.7. Atividades desenvolvidas no âmbito da temática forense**

Os projetos em andamento de interesse da área forense tiveram seu desenvolvimento retomado depois da interrupção causada pela pandemia Covid-19.

As atividades de coleta de dados referente ao projeto de desenvolvimento de métodos de inspeção de drogas com base em espectroscopia NIR foram concluídas e os modelos preliminares de classificação das drogas ilícitas estudadas foram construídos. No período o Dr. Raílson Oliveira foi incorporado ao grupo do INCTAA que desenvolve as atividades da linha forense. O Dr. Raílson Oliveira desenvolve em Campina Grande – PB o programa de aquisição dados dos espectrofotômetros NIR portáteis que irá proporcionar a interface dos modelos construídos com os peritos em cenas de crime, fornecendo os resultados analíticos em tempo real.

Destaca-se que as atividades desenvolvidas descritas nos itens 9.2 e 9.6 deste relatório também se associam ao tema forense. No entanto por estarem contidas em uma proposta desenvolvida pelo INCTAA de interesse específico do MCTI e Ministério da Cidadania, elas foram abordadas em itens específicos.

O **APÊNDICE IX** deste relatório descreve mais detalhadamente os resultados obtidos no período e permite avaliar o envolvimento dos pesquisadores do INCTAA no desenvolvimento do tema Forense.

### **9.8. Atividades desenvolvidas em educação e divulgação da ciência e tecnologia**

O INCTAA tem o compromisso de desenvolver ações que contribuem para a educação e divulgação da ciência e tecnologia em diversos níveis.

A divulgação científica pode contribuir para que os cidadãos compreendam como a ciência e tecnologia se desenvolvem e quais benefícios para a sociedade, justificando assim, a demanda de investimentos na área, principalmente nas universidades públicas. No Brasil, ainda existe uma grande necessidade de atividades de popularização científica. Em particular, na região do Alto Sertão do Pajeú-Pernambuco, antes da instalação da Unidade Acadêmica de Serra Talhada (UAST) da Universidade Federal Rural de Pernambuco (UFRPE), as ações de divulgação da ciência eram incipientes. O processo de interiorização e democratização para o acesso ao ensino superior, contribuiu para popularizar a ciência no Brasil e com o apoio do Instituto Nacional de Ciências e Tecnologias Analíticas Avançadas (INCTAA) /CNPq, um grupo de docentes participantes do instituto vem atuando de várias formas para popularizar a ciência, nos diversos níveis de ensino, buscando novos talentos, motivando os estudantes e professores da região sertaneja. É de grande importância que os cientistas divulguem seus trabalhos realizados nos laboratórios de pesquisas numa linguagem mais simples para que a sociedade possa compreender a importância da ciência para o verdadeiro progresso de uma nação. As ações do presente projeto foram realizadas no âmbito acadêmico, escolar e nas ruas da região do Alto Sertão do Pajeú em Pernambuco, com o intuito de divulgar e popularizar a química aplicada, destacando a química analítica por meio de experimentos, teorias e contextualização, bem como despertar a curiosidade e incentivar o interesse dos alunos e das pessoas da comunidade pela área. Além de contribuir para a popularização da química, o projeto atuou como ferramenta na melhoria da formação dos estudantes de graduação e pós-graduação da Unidade Acadêmica de Serra Talhada-UFRPE (por meio de eventos e minicursos oferecidos), estudantes na educação básica (por meio de oficinas, palestras e feira científica) e contribuindo também para o desenvolvimento profissional do professor universitário e do ensino médio (por meio de minicursos e eventos). Isso se tornou possível, a partir da elaboração, planejamento e realização conjunta de experiências vivenciadas por toda equipe envolvida

Procura-se empregar nestas ações uma linguagem mais acessível ao grande público, de forma que elas contribuam com a valorização da ciência e tecnologia pela sociedade em geral.

A página do INCTAA na web (<https://www.inctaa.org/>) apresenta uma **coleção de vídeos** cujos conteúdos visam a disseminação do conhecimento adquirido por seus pesquisadores.

No período referente a este relatório destacam-se as atividades desenvolvidas o pelo grupo de pesquisadores de Serra Talhada – PE voltadas para a divulgação da Química e Química Analítica:

- Organização I Jornada de Química Aplicada e Áreas Afins no Sertão do Pajeú: 200 anos da independência do Brasil: a química na evolução das ciências e tecnologias, 21 a 23 de setembro de 2022.

- Organização da Feira de Ciências, Tecnologia e Inovação (VI FECITI : Bicentenário da Independência do Brasil) EREM Dário Gomes de Lima, Fátima/Flores (14 de dezembro de 2022);

-Organização da Exposição na Praça de Serra Talhada: a ciência como ferramenta para o empoderamento das mulheres e meninas do sertão pernambucano, 14 de fevereiro de 2023.

- Organização da X semana de química da UAST/UFRPE: 15 anos do curso de licenciatura em química no sertão do Pajeú, 21 a 24 de novembro de 2022.

Contando com a participação de 150 participantes. No evento foram ministrados 09 minicursos, 06 oficinas e 03 palestras e 02 mesas redondas por professores e pesquisadores de diferentes universidades e instituições. No ano em que se comemora 15 anos do curso de Licenciatura em Química da Unidade Acadêmica de Serra Talhada, retomamos, na sua décima edição, a Semana de Química da UAST (SeQUAST), que tem como tema central “15 anos de Licenciatura em Química no Sertão do Pajeú”. A X SeQUAST soma-se aos diferentes espaços educativos e de formação de professores de Química proporcionados aos discentes do curso e demais profissionais da área interessados que estudam/trabalham na região do sertão do Pajeú e cidades circunvizinhas, inclusive do sertão da Paraíba. Essa semana foi pensada tanto para estudantes, como para professores do Curso de Licenciatura em Química da UAST e demais cursos de graduação com áreas afins, além de egressos e professores da rede de ensino municipal e estadual da área de Ciências da Natureza.



Fotos do evento X Semana de Química da UAST/UFRPE.

### 9.8.1 Palestras

1. Araújo, M. C. U. Palestra: Approaches Workshop: Present and Future of Analytical Chemistry. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica – ENQA, 2022, Bento Gonçalves-RS, Brasil.
2. Brito, A. M. S. S. Palestra: a interiorização do ensino superior. In: Encontro de Gestores do Ensino Médio Serra Talhada e Região (02/junho/2022), Serra Talhada-PE, Brasil.
3. Brito, A. M. S.S. Palestra: A importância da Ciência e da UAST para Serra Talhada, durante Mostra de Ciência da Escola Inero Ignácio Serra Talhada, 06 de junho de 2023, Serra Talhada-PE, Brasil.
4. Brito, A. M. S.S. Palestra: A universidade e seu mundo de possibilidades. In: Semana de Integração da UAST, 29 de maio de 2023, Serra Talhada-PE, Brasil.
5. Brito, A. M. S.S. Palestra: Água no preparo de bebidas e alimentos: diretrizes ambientais e padrão de qualidade, durante a VIII semana de Biologia da UAST, 31 de agosto a 01 de setembro de 2022, Serra Talhada-PE, Brasil.
6. Brito, A. M. S.S. Palestra: Os desafios da profissão docente vivenciados por meio de ações de enfrentamento, durante PIBID e residência pedagógica em ação-UFPB, 24 de fevereiro de 2023, Online, Paraíba- Brasil.

7. Canela, M.C. Palestra: A química entre quatro paredes. In: XVIII Encontro Regional da Sociedade Brasileira de Química, 2022, Rio de Janeiro-RJ, Brasil.
8. Canela, M.C. Palestra: Dos Plásticos aos microplásticos: O que eu tenho que ver com isso? Colégio Estadual Nelson Pereira Rebel, 2023, Campos dos Goytacazes-RJ, Brasil.
9. Fernandes, A.N. Microplastic pollution: scientific challenges concerning their formation, transport, and environmental effects. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, Bento Gonçalves-RS, 2022.
10. Fernandes, A.N. Palestra: Do Monte Everest ao corpo humano: microplásticos invisíveis e inegáveis. In: Semana do Meio Ambiente da UFRGS, Porto Alegre-RS, 2023.
11. Fernandes, A.N. Palestra: Microplásticos, Contaminantes Onipresentes: Mas Eles Podem ser Prejudiciais? In: III Encontro Brasileiro de Desreguladores Endócrinos – III EBDE, Rio de Janeiro-RJ, 2022.
12. Fernandes, A.N. Palestra: Microplásticos, uma ameaça onipresente. In: Palestra aos trabalhadores da ITAIPU, Foz do Iguaçu-PR, 2023. (Virtual)
13. Fernandes, A.N. Palestra: Pequenos, mas poderosos: a presença alarmante de microplásticos em ecossistemas de água doce no Brasil. In: Encontro Científico sobre Microplásticos, São Paulo-SP, 2023.
14. Fernandes, A.N. Palestra: Poluição microplástica em ecossistemas aquáticos. In: IX Seminário de Tecnologia Inovação e Desenvolvimento Social, Caxias do Sul-RS, 2022. (Virtual)
15. Grassi, M. T. Advances, Perspectives and Research Opportunities at the National Institute of Advanced Analytical Science and Technology (INCTAA). In: 20º ENQA & 8th CIAQA. Bento Gonçalves-RS. 2022. (Apresentação de palestra).
16. Grassi, M. T. Dissolved iron and its speciation in surface waters of admiralty bay – Antarctic Peninsula. In: 20º ENQA & 8th CIAQA. Bento Gonçalves-RS. 2022. (Apresentação de palestra).
17. Grassi, M. T. Pesquisa brasileira na Antártica: a biogeoquímica do ferro na Baía do Almirantado. In: XXXVII Semana de Química da UEL. Londrina-PR. 2022. (Palestra de abertura).
18. Grassi, M. T. Poluentes emergentes na água: ameaças invisíveis à saúde e aos ecossistemas no. In: VII Simpósio Internacional Ciência, Saúde e Território. UNIPLAC. Lages-SC. 2023. (Palestra).
19. Honorato, F. A. Quimiometria no combate à fraude em alimentos. In: 46ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química - Workshop sobre Quimiometria e Estatística Aplicada à Química, 2023, Águas de Lindóia-SP, Brasil.
20. Nascimento, E. C. L. Avanço das ciências e tecnologias na resolução de crimes: estudo de caso sobre o assassinato da atriz global Daniella Perez. In: I Jornada de Química Aplicada e Áreas Afins no Sertão do Pajeú, setembro/2022. Serra Talhada-PE, Brasil.



21. Orlando, R. M. Palestra: Advancing Sample Preparation Strategies: Collaborative Objectives and Challenges Between the Laboratory of Microfluidics and Separations (DQ - UFMG - Brazil) and the Department of Electromigration Methods (UIACH - Brno - Czech Republic) In: Palestra na Academia de Ciências da República Tcheca, 2023, Brno-Morávia do Sul, República Tcheca.
22. Paim, A.P.S. Palestra: New strategies for food and beverage analysis based on the use of Nanoparticle. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves - RS, Brasil
23. Pimentel, M.F. Palestra: Virtual samples for calibration, standardization, simulation and Classification. In 20th ENQA - Brazilian Meeting on Analytical Chemistry, 2022, Bento Gonçalves – RS.
24. Rocha, F. R. P. Palestra: Fast and green approaches for detection of adulteration: a demand of the milk production chain. In: 20th ENQA - Brazilian Meeting on Analytical Chemistry and 8th CIAQA - Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves-RS, Brasil.
25. Simeone, M. L. F. Análise da composição química de grãos de milho e sorgo utilizando espectroscopia no infravermelho próximo e métodos de calibração multivariada. Visita técnica de alunos do curso de Engenharia de Alimentos-UFSJ à Embrapa Milho e Sorgo, 2023, Sete Lagoas-MG, Brasil.

### 9.8.2. Seminários

1. Brito, A. M. S. S. Minicurso: Noções gerais sobre o uso de laboratórios químicos e biotecnológicos: segurança, preparação de soluções e análise por volumetria de neutralização. In: VIII semana de Biologia da UAST, 31 de agosto a 01 de setembro de 2022, Serra Talhada-PE, Brasil.
2. Brito, A. M. S. S. Minicurso: Uso de laboratórios químicos e biotecnológicos: segurança, preparação de soluções e análise por volumetria de neutralização. In: VII semana da Saúde na UAST, 27 a 29 de março de 2023, Serra Talhada-PE, Brasil.
3. Cadore, S. “A Má-conduta Assombra a Pesquisa de Qualidade”. Seminários I. Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas. UFSM, Santa Maria, RS, 15/05/2023
4. Cadore, S. “A Pesquisa Científica e os Desafios de sua Publicação”. Seminários I. Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas. UFSM, Santa Maria, RS, 15/05/2023
5. Gaião, E. N. OFICINA: Construção de um espectrógrafo para observação de raios de elementos químicos In: I Jornada de Química Aplicada e Áreas Afins no Sertão do Pajeú, setembro/2022. Serra Talhada-PE, Brasil.
6. Hespanhol, M. C. Palestra: Estratégia verde para recuperação de metais críticos e preciosos a partir de resíduos. In: Ciclo de Webnários "Integra Química" – DEQ-CCE-UFV, 2022, Viçosa-MG, Brasil.

7. Montagner, C.C. Assessing the fate and impacts of pesticides in the environment – key points from the chemistry perspectives. 17th Live Webinar BrJAC, 2022.
8. Paim, A.P.S. Colóquio: Dia Internacional das Mulheres: A Ciência gerada por Amor. In: Colóquio no Programa de Pós-graduação em Química da Universidade Federal de Pernambuco, 2023, Recife-PE
9. Pimentel, M.F. Seminário: ‘Ciência Forense’ durante o evento de extensão “Mulheres da Ciência”, promovido pelo(a) Departamento de Biofísica e radiobiologia do(a) Centro de Biociências, 2023, Recife – PE.

### 9.8.3. Minicursos

1. Fernandes, A.N. Grassi, M.T. Minicurso: Microplastics in natural waters: environmental aspects and analytical challenges. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, Bento Gonçalves-RS, 2022.
2. Pereira, C. F. Multivariate data analysis: from nano to macro analytical systems. 20o. ENQA, 8th CIAQA - Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 25 a 28 de Setembro, 2022.

### 9.8.4. Mesas - redondas

1. Brito, A. M. S. S. Mesa-redonda: Experiências para além da sala de aula: possibilidades a partir do curso de licenciatura em química. In: X semana de química da UAST, 23 de novembro de 2022, Serra Talhada-PE, Brasil.
2. Brito, A. M. S. S.; Gaião, E. N. Mesa-redonda: Os 15 anos do curso de licenciatura em química da UAST. In: X semana de química da UAST, 21 de novembro de 2022, Serra Talhada-PE, Brasil.
3. Nogueira, A.R.A. Moderador Painel 6 - Programas de Ensaio de Proficiência como melhoria da qualidade dos laboratórios de alimentos e bebidas. In: MetroAlimentos 2022, online [<https://www.remesp.org.br/eventos/programa/metroalimentos-2022/>].
4. Pereira, C. F.; Dias, D.; Dantas, K. G. F.; Korn, M. G. A. Women in Analytical Chemistry, 20o. ENQA, 8th CIAQA - Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 25 a 28 de Setembro, 2022.

### 9.8.5. Organização de eventos

1. Barbin, D.F.; Pasquini, C.; Vidal, C. Comissão Organizadora do II International Workshop on Hyperspectral Imaging – UNICAMP, 2023, Campinas-SP.
2. Brito, A. M. S.S.; Silva, F. C.V.; Nascimento, H. H. F.; Diniz Júnior, A. I.; Araújo, A. T.; Gaião, E. N.; Ferreira, E. B.; Braga, K. A. S. A. X Semana de Química: 15 anos do curso de licenciatura em Química na UAST/UFRPE. 21 a 25 de Novembro/2022, Serra Talhada-PE, Brasil. Página do evento: <https://www.even3.com.br/xsequast/>



3. Brito, A.M.S.S.; Gaião, E. N.; Nascimento, E. C. L.; Pereira, J. F. Q.; Vitorino, G. B. L.; Silva, J. R.S. I Jornada de Química Aplicada e Áreas Afins no Sertão do Pajeú. Setembro/2022, Serra Talhada-PE/Brasil. Página do evento: <https://giaquastufrpe.wixsite.com/jornadadequimicaapli>
4. Brito, A.M.S.S.; Gaião, E. N.; Pereira, J. F. Q.; Vitorino, G. B. L.; Silva, J. R.S, Simões, A. N.; .Barbosa, G. K. A. ; Oliveira, C. B. Exposição na praça: a ciência como ferramenta para o empoderamento das mulheres e meninas do sertão pernambucano, fevereiro/2023, Serra Talhada-PE, Brasil. Link global: <https://iupac.org/gwb/>
5. Fernandes, A. N.; Montagner, C.; Waldman, W. R.; Grassi, M. T.; Canela, M. C.; Vidal, C.; Bertoldi, C.; Sodré, F.; Abate, G.; Fadini, P.; Urban, R. Organização de Workshop sobre Microplásticos do INCTAA com a participação de todos os pesquisadores do grupo e estudantes de graduação e pós-graduação. Campinas-SP, 2023.
6. Nogueira, A.R.A. Membro da Comissão Organizadora da 14ª Jornada Científica Embrapa São Carlos, 2022, São Carlos-SP, online [<https://www.embrapa.br/busca-de-eventos/-/evento/467216/14-jornada-cientifica-embrapa-sao-carlos>].
7. Rocha, F. R. P. Pint of Science-2023, Piracicaba, 23 e 24/5/2023, membro da Comissão organizadora. <https://pintofscience.com.br/events/piracicaba>

## 10. Conclusão

Este relatório demonstra que os pesquisadores do INCTAA atuaram no período de vigência do projeto junto à FAPESP de forma a cumprir a missão do instituto atingindo todas as metas apresentadas quando da aprovação do projeto. Os resultados obtidos pelo instituto contribuíram para desenvolver e impulsionar as Ciências e Tecnologias Analíticas brasileiras a um patamar de qualidade em nível internacional.

A tabela 10.1 mostra os resultados consolidados obtidos pelo INCTAA, fase II, no decorrer dos seis anos de vigência do projeto. Com pode ser observado, a produção acadêmica deste último ano de atuação do instituto evidenciou o impacto da interrupção das atividades presenciais durante o período da pandemia da Covid-19.

Grande parte das realizações do INCTAA resultaram da atuação em rede com a participação de um número significativo de pesquisadores do INCTAA alocados em diversas instituições de ensino e pesquisa distribuídas pelo país.

O projeto INCTAA/FAPESP encerrou sua vigência em 30 de junho de 2023. No entanto, as atividades do instituto irão continuar até 30 de novembro de 2024, considerando que o CNPq estendeu a sua vigência e aportou recursos adicionais para a continuidade do INCTAA por mais um ano.

Finalmente, gostaria como coordenador de agradecer à FAPESP pelo suporte financeiro dedicado ao INCTAA durante suas duas fases, certo de que seus pesquisadores retribuíram à altura a confiança neles depositada.

**Tabela 10.1.** Resultados consolidados da produção acadêmica do INCTAA ao longo da vigência junto à FAPESP.

	2018	2019	2020	2021	2022	2023
<b>FORMAÇÃO DE RECURSOS HUMANOS</b>						
Dissertações de mestrado concluídas	16	14	25	17	15	12
Teses de doutorado concluídas	14	19	17	11	11	11
Supervisões de pós-doutorado concluídas	*	11	8	8	6	7
<b>INDICADORES DE PESQUISA, PRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TÉCNICO-CIENTÍFICA</b>						
Artigos publicados	55	67	72	101	69	44
Patentes (solicitadas ou concedidas)	-	4	12	6	2	5
Livro	-	1	-	-	1	1
Capítulos de livro	3	12	14	1	8	2
Cursos e Mini-cursos	1	2	9	3	1	2
Palestras, seminários, Conferências, Mesa-redonda, entrevista, divulgação científica	17	21	23	26	19	47
Participação em Congressos Nacionais	34	64	28	36	12	48
Participação em Congressos Internacionais	17	12	42	10	11	24
Eventos realizados	3	-	9	6	1	7

## 11. Descrição e avaliação do apoio institucional recebido no período

O único apoio institucional recebido no período deste relatório refere-se à atribuição de um técnico nível superior que atua junto aos pesquisadores que participam do INCTAA no IQ-UNICAMP. Este técnico foi alocado nos laboratórios dos pesquisadores do INCTAA ainda na primeira etapa do projeto, anterior a vigência do atual projeto FAPESP.

## 12. Plano de atividades para o próximo período

O projeto INCTAA encerra-se junto à FAPESP com este relatório. No entanto, suas atividades de pesquisa em suas diversas linhas se manterão ativas até o final de 2024 quando a sua vigência será encerrada junto ao CNPq. Trabalhos ainda em andamento serão concluído até esta data.

## 13. Participação em eventos científicos financiados pela FAPESP.

Não houve participação em eventos científicos financiados pela FAPESP com recursos alocados ao INCTAA.

## 14. Lista da produção acadêmica resultante do auxílio no período a que se refere este Relatório Científico

### 14.1. Artigos em revistas científicas indexadas

1. Brandão, S. C. R.; Da Silva, E. M.; De Arruda, G. M. P.; Netto, J. M. S.; De Medeiros, R. A. B.; Honorato, F. A.; Azoubel, P. M. Ethanol pretreatment and infrared drying of melon: Kinetics, quality parameters, and NIR spectra. *Journal Of Food Process Engineering*, 46 (2022) e14269. DOI: 10.1111/jfpe.14269
2. Ciarnoschi, L. D.; Oliveira, L. C. de; Simeone, M. L. F.; Panero, F. dos S.; Panero, P. dos S.; Ruiz Rodriguez, A.; Alves Filho, E. G.; Pereira, M. G.; Silva, L. M. da. Prediction of dry matter, carbon and ash contents and identification of *Calycophyllum spruceanum* (Benth) organs by Near-Infrared spectrophotometry. *Microchemical Journal*, 180 (2022) 107621. DOI: 10.1016/j.microc.2022.107621
3. Costa, F. S.; Moreira, L. S.; Silva, A. M.; Silva, R. J.; Dos Santos, M. P.; Da Silva, E. J. P.; Grassi, M. T.; Gonzalez, M. H.; Amaral, C. D. B. Natural deep eutectic solvent-based microwave-assisted extraction in the medicinal herb sample preparation and elemental determination by ICP OES. *Journal of Food Composition and Analysis*, 109 (2022) 104510. DOI: 10.1016/j.jfca.2022.104510.
4. Costa, J. B. S.; Silva, F.A.O.; Trindade, F.C.S.; Lavorante, A.F.; Gomes, D.F.; Figueiredo, J.F.D.; Paim, A.P.S. Sensor film based on electrical resistance of graphene nanoplatelets and polystyrene (XGNP/PS): fabrication, characterization, and application. *Journal of Materials Science: Materials in Electronic*, 33 (2022) 14927–14937. DOI: 10.1007/s10854-022-08409-0
5. da Cruz Souza, J.; Soares, S. F. C.; Paula, L. C. M.; Coelho, C. J.; Araújo, M. C. U.; Silva, E. C. Bat algorithm for variable selection in multivariate classification modeling using linear discriminant analysis. *Microchemical Journal*, 187 (2023) 108382. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.microc.2022.108382>.
6. Da Cunha, D.A.L.V.; Ribessi, R.L.; Hernandez, A.C.; Raimundo Jr., I.M.; Aroca, R.V.; Branciforti, M.C. Online near-infrared spectroscopy for automatic polymeric material identification, *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, 44 (2022) 338. DOI: 10.1007/s40430-022-03645-1
7. Dal-Bó, A. G.; Westrup, J. L.; Fiorin, D. G.; Ruschel, P. M. C.; Silva, C. K. H.; Cercena, R. Peterson, M.; Colonetti, E.; Fernandes, A. N. Efficient removal of Mn<sup>2+</sup> ions from aqueous solutions using apple pomace biochar. *Chemical Engineering Communications*, 210 (2023) 1-18. DOI: 10.1080/00986445.2023.2218295
8. Dias, M. A.; Batista, P. R.; Ducati, L. C.; Montagner, C. C.; Insights into sorption and molecular transport of atrazine, testosterone, and progesterone onto polyamide microplastics in different aquatic matrices. *Chemosphere*, 308 (2023) 137949. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2023.137949

9. Diniz, V., Cunha, D.G.F., Rath, S. Adsorption of recalcitrant contaminants of emerging concern onto activated carbon: a laboratory and pilot-scale study. *Journal of Environmental Management*, 325, (2023) 116489. DOI: 10.1016/j.jenvman.2022.116489.
10. Dolatto, R. G.; Pont, G. D.; Vela, H. S.; Camargo, M.S.; Neto, A.O.; Grassi, M.T. Aromatic hydrocarbons extracted by headspace and microextraction methods in water-soluble fractions from crude oil, fuels and lubricants. *Analytical Sciences*, 39 (2023), 573-587. DOI: 10.1007/s44211-023-00274-z.
11. Favero, U. G.; Schaeffer, N.; Passos, H.; Cruz, K. A. M. L.; Ananias, D.; Dourdain, S.; Hespanhol, M. C. Solvent extraction in non-ideal eutectic solvents - application towards lanthanide separation. *Separation and Purification Technology*, 314 (2023) 123592. DOI: 10.1016/j.seppur.2023.123592
12. Giraldo-Bareño, Y. Y.; Pinzon-Garcia, A. D.; Sousa, D. V. M.; Filho, L. F. O. B.; Lopes, D. H. A.; Cortes, N. S.; Moravia, M. C. S. A.; Sinisterra, R. D.; Orlando, R. M. Efficient and easily scaled-up biosorbent based on natural and chemically modified macauba (*Acrocomia aculeata*) to remove Al<sup>3+</sup>, Mn<sup>2+</sup> and Fe<sup>3+</sup> from surface water contaminated with iron mining tailings, *Talanta*, 256 (2023) 124273 DOI: 10.1016/j.talanta.2023.124273.
13. Gonçalves, I. C.; Soares, S.; Rocha, F. R. P. Exploiting microdistillation and smartphone-based digital-image colorimetry for determination of protein in foods. *Microchemical Journal*, 188 (2023) 108461. DOI: 10.1016/j.microc.2023.108461
14. Namikuchi, E.A.; Gaspar, R.D.L.; Raimundo Jr., I.M.; Mazali, I.O. A fluorescent magnetic core-shell nanosensor for detection of copper ions in natural waters, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 300 (2023) 122915. DOI: 10.1016/j.saa.2023.122915
15. Nectoux, A. S.; Medeiros, L. F.; Leão, M. B.; Fernandes, A. N. Electrospun polymeric membranes: Potential removal of endocrine disrupting compounds using solid membrane extraction and filtration processes. *Journal of Applied Polymer Science*, 140 (2022) p. 1. DOI: 10.1002/app.53256
16. Netto, J.M; Honorato, F.A; Celso, P.G.; Pimentel, M.F. Authenticity of almond flour using handheld near infrared instruments and one class classifiers. *Journal of Food Composition and Analysis*, 115 (2023) 104981. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2022.104981>
17. Nóbrega, D.; Lourenço, A.; Fernandes, D. D.; Lyra, W.; Moreira, E.; Diniz, P. H.; Araújo, M. Determination of Coumarin in *Mikania glomerata* Infusions by Square-Wave Voltammetry Using a Boron-Doped Diamond Electrode. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 34 (2023) 838-845. DOI: 10.21577/0103-5053.20220152.
18. Nóbrega, R. O.; da Silva, S. F.; Fernandes, D. D. S.; Lyra, W. S.; de Araújo, T. K. L.; Diniz, P. H. G. D.; Araújo, M. C. U. Classification of instant coffees based on

caffeine content and roasting degree using NIR spectrometry and multivariate analysis. *Microchemical Journal*, 190 (2023) 108624. DOI: 10.1016/j.microc.2023.108624.

19. Ortega Fernández, L. M.; Uribe Ante, D. M.; Grassi, M. T.; Dolatto, R. G.; Sánchez, N. E. Determination of polycyclic aromatic hydrocarbons extracted from lichens by gas chromatography-mass spectrometry. *MethodsX* 9 (2022) 101836, 2022. DOI: 10.1016/j.mex.2022.101836.

20. Palacio-Cortés, A. M.; Horton, A. A.; Newbold, L.; Spurgeon, D.; Lahive, E.; Pereira, M. G.; Grassi, M. T.; Moura, M. O.; Disner, G. R.; Cestari, M. M.; Gweon, H. S.; Navarro-Silva, M. A. Accumulation of nylon microplastics and polybrominated diphenyl ethers and effects on gut microbial community of *Chironomus sancticarloi*. *Science of the Total Environment*, 832 (2022) 155089. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2022.155089.

21. Patricio, L. C. L. C. B.; Sales, R. F.; Silva, N. C.; Silva, M. E. F.; Brito, L. R. E.; Pimentel, M. F. An approach based on virtual samples for gasoline discrimination using physicochemical properties or distillation curves. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 231 (2022) 104698. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2022.104698>.

22. Resende, G. A. P.; Freitas, M. C.; Orlando, R. M.; Botelho, B. G. Low-solvent multiphase electroextraction of caprylic acid in cider and mead samples followed by LC-MS/MS quantification. *Food Analytical Methods*, 16 (2022) 340–348. DOI:10.1007/s12161-022-02418-9.

23. Ribeiro, M. R.; Simeone, M. L. F.; Trindade, R. dos S.; Dias, L. A. dos S.; Guimaraes, L. J. M.; Tibola, C. S.; Azevedo, T. C. de. Near infrared spectroscopy (NIR) and chemometrics methods to identification of haploids in maize. *Microchemical Journal*, 190 (2023) 108604. DOI: 10.1016/j.microc.2023.108604

24. Rodrigues, A.S.; Pinto, L.; Paim, A.P.S. Evaluation of acid digestion methodology in poly (ethylene terephthalate) resin for elementary determination by ICP OES *Polymer Bulletin* (2022). DOI: 10.1007/s00289-022-04518-2

25. Sá, Í.P.; Silva, C.A.; Nogueira, A.R.A. Chemical Speciation of Arsenic and Chromium in Seafood by LC-ICP-MS. *Brazilian Journal of Analytical Chemistry - BrJAC (Online)*, (2023) 1-19. DOI: 10.30744/brjac.2179-3425.AR-13-2023

26. Sánchez-Duque, G.; Lozada-Castro, J. J.; Hara, E. L. Y.; Grassi, M. T.; Rosero-Moreano, M.; Ríos-Acevedo, J. J. Alternative Ecosorbent for the Determination of Trihalomethanes in Aqueous Samples in SPME Mode. *Molecules* 27 (2022) 8653. DOI: 10.3390/molecules27248653.

27. Santana, R. M. M.; Pereira-Junior, L.; Paereira, M. D. S.; Korn, M. Screening analysis - an alternative for real-time analysis and greener microwave-assisted persulfate decomposition of flavored beverages. *Talanta Open*, 7 (2023) 100229. DOI: 10.1016/j.talo.2023.100229

28. Santos, H.M.; Higuera, J.M.; Nogueira, A.R.A. Multi-energy calibration and aerosol dilution as analytical strategies to access the in vitro bioaccessibility of essential

elements and arsenic in raw and cooked shrimp by plasma-based methods. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 38 (2023) 681-692. DOI: 10.1039/d2ja00396a

29. Santos, V. S.; Anjos J. S. X.; Medeiros J. F.; Montagner, C.C.; Impact of agricultural runoff and domestic sewage discharge on the spatial-temporal occurrence of emerging contaminants in an urban stream in São Paulo, Brazil. *Environmental Monitoring Assess*, 194 (2022) 637. DOI: 10.1007/s10661-022-10288-1

30. Silva, A. F. S.; Rocha, F. R. P. Innovative prediction of milk microbiological quality from pH measurements by digital imaging photometry. *Journal of Food Composition and Analysis*, 114 (2022) 104715. DOI: 10.1016/j.jfca.2022.104715

31. Silva, E. G.; Silva, C. S.; Pimentel, M. F.. Infrared spectroscopy for document dating - Advantages, challenges and limitations. *Talanta Open*, 5 (2022) 100102. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.talo.2022.100102>

32. Silva, I.J.G.; Raimundo Jr., I.M.; Mizaikoff, B. Analysis of Sugars and Sweeteners via Terahertz Time-Domain Spectroscopy, *Analytical Methods*, 14 (2022), 2657-2664. DOI: 10.1039/D2AY00377E

33. Silva, K. D.; Andrade, S. I. E.; Lima, M. B.; Monte-Filho, S. S.; Araújo, M. C. U.; Lima, R. A. C. Carbon dots from *Pilosocereus gounellei* for fluorimetric determination of tannin in tea using a flow-batch system. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 34 (2022) 103-111. DOI: 10.21577/0103-5053.20220092.

34. Soares, F.; Ramalho, R.; Silva, A.; Araújo, M. C. U. A voltammetric method for diuron determination in river water. *Electroanalysis*, 35 (2023) 1-9. DOI: 10.1002/elan.202200486.

35. Soares, S.; Donati, G. L.; Rocha, F. R. P. Digital-image photometry with multi-energy calibration. *Microchemical Journal*, 182 (2022) 107938. DOI: 10.1016/j.microc.2022.107938

36. Sousa, D. V. M.; Pereira, F. V.; Boratto, V. H. M.; Orlando, R. M. Multiphase electroextraction as a simple and fast sample preparation alternative for the digital image determination of doxorubicin in saliva. *Talanta*, 255 (2023) 1-6. DOI: 10.1016/j.talanta.2022.124242 (artigo de capa)

37. Souza, F.L.A.; Amorim, C.G.; Araújo, A.N.; Šatínský, D.; Paim, A.P.S.; Montenegro, M.C. B. S. M. Malachite Green Optical Sensor Based on Electrospun Polyimide Nanofiber. *Chemosensors* 10 (9) (2022) 348-361. DOI: 10.3390/chemosensors10090348

38. Souza, J. C.; Hespanhol, M. C.; Rocha, F. R. P.; Pasquini, C. Exploiting chemometrics for screening analysis by near-infrared spectroscopy without the support of reference analytical methods: Application to bulk sweeteners. *Microchemical Journal*, 190 (2023) 108732. DOI: 10.1016/j.microc.2023.108732

39. Thiengo, F. F.; Elias, A. C.; Luz, M. S.; Intima, D. P.; Gaubeur, I.; Naozuka, J.; Rocha, F. R. P.; Nomura, C. S. Evaluation of calibration approaches for quantitative



analysis of sludge by laser induced breakdown spectrometry. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 38 (2023) 131–141. DOI: 10.1039/d2ja00292b

40. Viegas, I. M. A.; Gonçalves, I. W. V.; Santos, B. S.; Fontes, A.; Pereira, M. G. C.; Pereira, C. F.; Pereira, G. A. L. Synthesis of hydrophilic Ag<sub>2</sub>Se quantum dots optically optimized by multivariate strategies: an easy one-pot approach. *New Journal of Chemistry*, 46 (2022) 21864 - 21874. DOI: 10.1039/D2NJ03696G

41. Vieira, J. M.; Souza, V. B.; Panunto, P. C.; Nicolosi, J. S.; do Nascimento da Silva, E.; Cadore, S.; Londono, O. M.; Muraca, D.; Tancredi, P.; de Brot, M.; Nadruz Jr., W.; Ruiz, A. L. T. G.; Knobel, M.; Andre Almeida Schenka, A. A.; “In vitro and in vivo acute toxicity of a novel citrate-coated magnetite nanoparticle”. *Plos One*. DOI :10.1371/journal.pone.0277396

42. Vizioli, B. C.; Montagner, C. C.; Questões regulatórias sobre a desinfecção da água e o impacto da geração de DBPs na qualidade da água tratada. *Química Nova*, 46 (2023) 390-404. DOI: 10.21577/0100-4042.20230029

43. Yamamoto, F. Y.; Pauly, G. E.; Nascimento, L. S.; Fernandes, G. M.; Santos, M. P.; Kim, B. S. M.; Carvalho, M. U.; Figueira, R. C. L.; Cavalcante, R. M.; Grassi, M. T.; Abessa, D. M. S. Chemical data of contaminants in water and sediments from the Doce River four years after the mining dam collapse disaster. *Data in Brief* 45 (2022) 108715. DOI: 10.1016/j.dib.2022.108715.

44. Yamamoto, F. Y.; Pauly, G. F. E.; Nascimento, L. S.; Fernandes, G. M.; Santos, M. P.; Figueira, R. C. L.; Cavalcante, R. M.; Grassi, M. T.; Abessa, D. M. S. Explaining the persistence of hazardous chemicals in the Doce River (Brazil) by multiple sources of contamination and a major environmental disaster. *Journal of Hazardous Materials Advances* 9 (2023) 100250. DOI: 10.1016/j.hazadv.2023.100250.

## 14.2 Artigos aceitos ou no prelo

1. Ramos, R. O.; Lopes, W. S.; Luna, Y. H. D. M.; Albuquerque, M. V. C.; Leite, V. D.; de Sousa, J. T.; Araújo, M. C. U. Treatment of wastewater for reuse using advanced oxidation process: a bacterial inactivation mechanism approach. *International Journal of Environmental Science and Technology* (2022). Artigo aceito para publicação.

2. Sá, I. P.; Higuera, J.M.; Silva, C.A.; Nogueira, A.R.A. Application of Box-Behnken Design to Optimize the Coprecipitation Parameters to Assess As and Cd Contamination in Marine Fish. *Research Square*. DOI: 10.21203/rs.3.rs-2207355/v1. Artigo aceito para publicação.

3. Santos, H.M.; Niciura, S.C.M.; Nogueira, A.R.A. Analytical Strategies and Method Validation to Access the Bioavailability of Essential Elements and Arsenic from Raw and Cooked Fish and Shrimp. *ACS Food Science & Technology*. DOI: 10.1021/acsfoodscitech.3c00132. Artigo aceito para publicação.



4. Sierpinski, S. F. D.; Martins, C. C; Laglera Baquer, L. M.; Grassi, M. T. Exploratory evaluation of iron and its speciation in surface waters of Admiralty Bay, King George Island, Antarctica. *Anais da Academia Brasileira de Ciências*, 2023. Artigo aceito para publicação.
5. Silva, N.A.; Raimundo Jr., I.M. Determination of scaling ions in oilfield produced water by laser-induced breakdown spectroscopy, *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, publicado como “advance article”. DOI: 10.1039/D3JA00124E

### **14.3. Artigos em revistas científicas não indexadas**

Nada consta no período.

### **14.4. Trabalhos apresentados em conferências internacionais**

1. Cunha, F., Santos-Sobrinha, I., Pereira, G., Pereira, C., Surface-Enhanced Infrared Absorption Spectroscopy (Seira) With Universal Attenuated Total Reflectance (UATR) Accessory”, 20th ENQA - Brazilian Meeting on Analytical Chemistry and 8th CIAQA -Congresso Ibero-Americano de Química Analítica (2022). (Apresentação: Poster)
2. Dias, M.A.; Batista, P.; Ducati, L.; Montagner, C. C. Combining experimental and theoretical approaches to investigate the sorption behavior of contaminants onto polyamide microplastics; UNESCO-IWRA Online Conference “Emerging Pollutants: Protecting Water Quality for the Health of People and the Environment” (2023); Apresentação: poster.
3. Diniz, V., Rath, S. Direct potable reuse: a prioritization of emerging contaminants for monitoring strategies and pilot-scale advanced treatment. UNESCO-IWRA Online Conference “Emerging Pollutants: Protecting Water Quality for the Health of People and the Environment”, 17-19 January 2023. (Oral)
4. Diniz, V., Rath, S. Emerging contaminants adsorption onto fixed-bed columns loaded with commercial activated carbon. UNESCO-IWRA Online Conference “Emerging Pollutants: Protecting Water Quality for the Health of People and the Environment”, 17-19 January 2023. (Poster).
5. Domingues, R.; Dias, M.A.; Starling, M.C.; Neves, T.A.; Montagner, C.C. Occurrence of Emerging Contaminants in the Pampulha Lake: anthropic pollution of a UNESCO Heritage Site. UNESCO-IWRA Online Conference “Emerging Pollutants: Protecting Water Quality for the Health of People and the Environment” (2023); Apresentação Oral.
6. Favero, U. G.; Schaeffer, N.; Cruz, K. A. M. L.; Passos, H.; Coutinho, J. A. P.; Hespanhol, M. C.; Coutinho, J. A. P. Evaluation of the potential of hydrophobic eutectic

solvents for lanthanides separation. In: International Solvent Extraction Conference (ISEC2022), 2022, Gotemburgo, Suécia. (Apresentação: Pôster)

7. Fonseca, V. F.; Dias, M. A.; Montagner, C.; Bertoldi, C.; Fernandes, A. N. Investigation of the presence of microplastics and organic contaminants in the estuarine zone of river Tramandaí. In: LatinXChem, 2022. (Apresentação: Pôster).

8. Gomes, R. S.; Waldman, W. R.; Fernandes, A. N. Structural modification of degradable bags submitted to different abiotic experimental conditions: A preliminary study. In: LatinXChem, 2022. (Apresentação: Pôster).

9. Lara, L. Z.; Bertoldi, C.; Waldman, W. R.; Fernandes, A. N. Sorption of estrilol (E3) in pristine and photodegraded polyamide microplastics and the influence of fulvic acid on the interaction. In: LatinXChem, 2022. (Apresentação: Pôster).

10. Madeira, C.L.; Dias, M.A.; Morishita, K.N.; Montagner, C.C. Interaction of the pesticide fipronil and its biodegradation products with polyethylene microplastics in ultrapure and river water. UNESCO-IWRA Online Conference “Emerging Pollutants: Protecting Water Quality for the Health of People and the Environment” (2023); Apresentação Oral.

11. Madeira, C.L.; Dias, M.A.; Morishita, K.N.; Montagner, C.C. Organic matter reduces the sorption capacity of the pesticide Fipronil onto polyethylene microplastics in surface water; Setac Europe 33rd Annual Meeting – Dublin – Irland (2023); Apresentação: poster.

12. Martins, L. C.; Soares, S., Rocha, F. R. P. Eco-friendly spot test with liquid-liquid microextraction for selective determination of flavonoids in berries. In: 2nd International Congress on Bioactive Compounds and 3rd International Workshop on Bioactive Compounds, 2022, Campinas-SP, Brasil. (Apresentação: Pôster).

13. Morishita, K. N.; Santos, V.S.; Madeira, C.L.; Dias, M.A.; Montagner, C.C. Interaction of polyethylene microplastics with imidacloprid and hexazinone; UNESCO-IWRA Online Conference “Emerging Pollutants: Protecting Water Quality for the Health of People and the Environment” (2023); Apresentação: poster.

14. Oliveira, L.F.L.; Silva, K.C., Canela, M.C. Collection and processing of water samples from the Paraíba do Sul River for microplastic analysis. LatinXChem. @LatinXChem <https://www.latinxchem.org/> - online, novembro, 2022 (Apresentação de Poster).

15. Raimundo Jr, I.M.; Silva, N.A. Determination of Scaling Ions Employing Phase Conversion to Filter Paper. In: XII World Conference on Laser Induced Breakdown Spectroscopy, 2022, Bari, Itália. (pôster).

16. Santos, L. K. dos, Simeone, M. L. F., Motta, I. P., Favaro, S, P. Determinação rápida do teor de extrato etéreo do Mesocarpo da macaúba utilizando infravermelho próximo (NIR). In: VI International Meeting on Fats and Oils: Adding Value to Fats and Oils Products, 2023, Campinas-SP, Brasil. (Apresentação: Pôster)

17. Santos, L.P.; Pereira, J.F.Q.; Raimundo Jr., I.M. Bentonite as a Substrate for Molecular LIBS Analysis of Liquids. In: XII World Conference on Laser Induced Breakdown Spectroscopy, 2022, Bari, Itália. (pôster).

18. Santos, V. S.; Moreira, A.B.; Bisinoti, M.C.; Montagner, C.C. Occurrence of emerging contaminants and microplastics in distinct river basins (urbanized and rural) in the State of São Paulo, Brazil; Setac Europe 33rd Annual Meeting – Dublin – Ireland (2023); Apresentação: poster.
19. Santos, V.S.; Moreira, A.B.; Bisinoti M.C., Montagner, C.C.; Occurrence and risk assessment of emerging contaminants in agricultural and urban hydrographic basins – similarities and differences among the human activities; UNESCO-IWRA Online Conference “Emerging Pollutants: Protecting Water Quality for the Health of People and the Environment” (2023); Apresentação Poster.
20. Silva, K. C.; Souza, M. O.; Canela, M. C. Experimental variables triage using persulfate and heterogeneous photocatalysis to degrade selected herbicides in water. In: 5th CIPOA-Iberoamerican Conference on Advanced Oxidation Technologies, 2022, Cuzco, Peru, p. 166 (Apresentação de Poster e short communication).
21. Soares, S.; Ramos-Lorente, C. E.; Rocha, F. R. P. Rocha, Erenas, M. M.; Orbe-Payá, I.; Capitán-Vallvey, L. F. Determinación in-situ de biodiésel en biocombustibles mediante smartphone. In: XVII Reunión del Grupo Regional Andaluz de la Sociedad Española de Química Analítica (GRASEQA 2022), 2022, Sevilla-Espanha. (Apresentação: oral).
22. Vidal, C., Pasquini C. Speeding up microplastics analysis using near-infrared hyperspectral imaging (HSI-NIR). In: ASTM Symposium on Microplastics Analytical and Reference Standards – Opportunities to Advance Microplastic Science, 2022, Seattle-EUA. (Apresentação: Oral, online)
23. Vidal, C.; Santos, V.S.; Montagner, C.C., Pasquini, C. Towards a fast characterization method for large sampling high throughput microplastics identification. In: UNESCO-IWRA Online Conference “Emerging Pollutants: Protecting Water Quality for the Health of People and the Environment”, 2023, online. Apresentação: Poster.
24. Xavier, N. G., Simeone, M. L. F., Queiroz, V. A. V., Silva, C. B. da, Magalhaes, J. V. de, Pastina, M. M. Using multispectral images to assess bioactive compounds in Sorghum. In: II International Workshop on Hyperspectral Imaging – Unicamp, 2023, Campinas-SP, Brasil. (Apresentação: Oral).

#### **14.5. Trabalhos apresentados em conferências nacionais**

1. Almeida, S. L.; Elias, A. C.; Naozuka, J.; Virgilio, A.; Rocha, F. R. P.; Nomura, C. S. Determination of Ca, Mg, K, and Mo in plant materials by laser induced breakdown spectroscopy. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves-RS, Brasil. (Apresentação: Pôster).
2. Alves, R. C. M.; Martins, L. C.; Rocha, F. R. P. Smartphone-based digital image photometric procedure for lactose determination in bovine milk. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves-RS, Brasil. (Apresentação: Pôster).

3. Andrade, F. M. ; Junior, R. A. ; Silva, R. S. ; Neto, P. N.A. ; Simões, D. A. ; Pimentel, M. F. . Exploratory analysis based on FTIR data of Bio-oils obtained from Thermal Liquefaction in a batch system. In: 20o Encontro Nacional de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves – RS, Brasil (apresentação: pôster)
4. Barbosa, A.L.; Torres, B.S.S.; Paim, A.P.S. Acid decomposition of denim samples for the determination of metals by ICP OES. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves - RS, Brasil. (Apresentação: Pôster)
5. Bertoldi, C.; Lara, L. Z.; Fernandes, A. N. What governs the presence of microplastics and what are their physical characteristics in River Guaíba? In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022. (Apresentação: Pôster).
6. Cruz, K. A. M. L.; Donati, G. L.; Hespanhol, M. C. Use of multi-energy calibration in the quantification of metals from nickel metal hydride batteries liquor In: 20o Encontro Nacional de Química Analítica e 8o CIAQA-Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves-RS, Brasil. (Apresentação: Oral e Pôster)
7. Cruz, K. A. M. L.; Rocha, F. R. P.; Hespanhol, M. C. Obtaining high purity lanthanum and cerium from nickel metal hydride battery waste using hydrophobic eutectic solvent In: 46ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2023, Águas de Lindóia. -SP, Brasil. (Apresentação: Pôster)
8. da Silva, A. T.; Souza, J. C.; Alves, L. S. P.; Teixeira, V. S.; Damascena, J. F.; Cruz, K. A. M. L.; Passos, H.; Schaeffer, N.; Hespanhol, M. C. Deep eutectic solvent for dissolution of discarded lithium-ion batteries In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8o CIAQA-Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves-RS, Brasil. (Apresentação: Pôster)
9. Dias, M.A.; Araújo, E.V.; Montagner, C.C. Matrix effect challenges to pesticide quantification in different layers of sugarcane; 46ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química Águas de Lindóia, SP (2023); (Apresentação: Oral e Poster).
10. Domingues, D. A.; Dolatto, R. G.; Castillho-Goméz, D., Rosero-Moreano, M. H.; Grassi, M. T. Ionic liquid intercalated in montmorillonite (IL-MMT) for extraction of PAHs by pipette tip solid phase extraction. 20º ENQA & 8th CIAQA, 2022. Bento Gonçalves-RS. Apresentação (Pôster).
11. Duarte, E. S. A.; Dias, M. A.; Montagner, C.; Bertoldi, C.; Fernandes, A. N. Microplastics and organic contaminants on the surface water of River Guaíba. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022. (Apresentação: Pôster).
12. Fernandes, G. M.; Rocha, F. R. P. A novel approach for lactate determination in milk exploiting kinetic monitoring by digital videos. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves-RS, Brasil. (Apresentação: Pôster)
13. Fonseca, A. C. ; Pimentel, M.F.; Honorato, R. S. ; Pereira, J. F. Q. . Identification of bloodstains of different ages deposited on substrates using handheld NIR

spectrometer. In: 20o Encontro Nacional de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves – RS, Brasil (Apresentação: pôster)

14. Fonseca, V. F.; Dias, M. A.; Montagner, C.; Bertoldi, C.; Fernandes, A. N. Preliminary study concern the presence of microplastics and organic contaminants in the estuarine zone of River Tramandaí. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022. (Apresentação: Pôster).

15. Gomes, R. S.; Waldman, W. R.; Fernandes, A. N. Preliminary study of structural modification of degradable bags submitted to different abiotic experimental conditions. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022. (Apresentação: Pôster).

16. Gomes, R. S.; Waldman, W. R.; Fernandes, A. N. Use of carbonyl index in monitoring polymer degradation: the case of polypropylene. In: 45ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2022. (Apresentação: Pôster).

17. Gonçalves, I. C.; Fernandes, G. M.; Rocha, F. R. P. A novel approach for urea determination in milk based on monitoring of enzymatic hydrolysis by digital images and videos. In: 46ª Reunião Anual da SBQ, 2023, Águas de Lindóia-SP, Brasil (Apresentação: Pôster).

18. Gonçalves, I. C.; Soares, S.; Rocha, F. R. P. A novel approach for determination of protein in food exploiting microdestillation and smartphone-based colorimetry. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves-RS, Brasil. (Apresentação: Pôster).

19. Lara, L. Z.; Bertoldi, C.; Waldman, W. R.; Fernandes, A. N. Characterization of photodegraded polyamide microplastics and its influence on the sorption of E3 in simulated conditions. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022. (Apresentação: Pôster).

20. Leão, M. B.; Grassi, M. T.; Jauris, C. F. M.; Fernandes, A. N. A new binding agent for sampling atenolol with diffusive gradients in thin-film devices. In: 45ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2022. (Apresentação: Pôster).

21. Leão, M. B.; Grassi, M. T.; Jauris, C. F. M.; Fernandes, A. N. A new binding agent for sorption of propranolol in o-DGT samplers. In: LatinXChem, 2022. (Apresentação: Pôster).

22. Leão, M. B.; Grassi, M. T.; Jauris, C. F. M.; Fernandes, A. N. Development of 3D graphene-based o-DGT devices for propranolol sampling. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022. (Apresentação: Oral e pôster).

23. Martineli, A. C. Rocha, F. R. P. Procedimento analítico para a determinação da atividade de lactoperoxidase em leite explorando fotometria com imagens digitais. In: 30º Simpósio Internacional de Iniciação científica e Tecnológica da USP, 2022, Piracicaba-SP, Brasil (Apresentação: Oral).

24. Martins, L. C.; Soares, S.; Rocha, F. R. P. Liquid-liquid microextraction and smartphone-based colorimetry for determination of flavonoids in berries. In: 20º Encontro



Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves-RS, Brasil. (Apresentação: Pôster).

25. Melo, B. H. S.; Sales, R. F. ; Silva, J. S. P. ; Peixoto, D. M. C. ; Bastos Filho, L. S. ; Sousa, A. G. C. A.; Pimentel, M. F. . Practical aspects of the use of portable NIR spectrometers in the sugarcane production. In: 20o Encontro Nacional de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves – RS, Brasil (apresentação: pôster)

26. Morishita, K. N.; Montagner, C.C. Sorption differences of pesticides onto sand and polyethylene microplastics;; 46ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química Águas de Lindóia, SP (2023). (Apresentação: Pôster).

27. Nascimento, A.F.L.M.; Raimundo Jr., I.M. Gold nanoparticles synthesized on paper substrate by ring-oven for intensification of LIBS emission. In: 46a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2023, Águas de Lindóia – SP, Brasil. (pôster). Prêmio de melhor poster.

28. Netto, J. M. S.; Honorato, F. A.; Pimentel, M. F. Purity of almond flour using handheld near infrared instruments and PLS regression. In: 20o. Encontro Nacional de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves - RS, Brasil. (Apresentação: Oral e Poster)

29. Nunes, M. F.; Elias, A. C.; Nunes, L. C.; Naozuka, J.; Rocha, F. R. P.; Nomura, C. S. Slope ratio calibration for analysis of refractory materials by laser induced breakdown spectroscopy. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves-RS, Brasil. (Apresentação: Pôster).

30. Oliveira, A.F.S.; Rohwedder, J.J.R.; Raimundo Jr., I.M. Determinação de benzeno e tolueno em águas por espectroscopia Raman. In: VII Encontro Brasileiro de Espectroscopia Raman, 2022, Águas de São Pedro – SP, Brasil. (pôster)

31. Oliveira, L.F.L.; Silva, K.C., Canela, M.C. Avaliação de tratamentos oxidativos em amostras reais de água do Rio Paraíba do Sul para mensurar contaminação por microplásticos. In: XVIII Encontro Regional da Sociedade Brasileira de Química, 2022, Rio de Janeiro-RJ, Brasil. (Apresentação de poster).

32. Patricio, L. C. B. ; Sales, R. F. ; Silva, N. C. ; Silva, M. E. F. ; Brito, L. R. E. ; Pimentel, M. F. . Use of virtual samples to discriminate among gasolines based on physicochemical properties or distillation curves. In: 20o Encontro Nacional de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves – RS, Brasil (apresentação: oral)

33. Rodrigues, A.S.; Pinto, L.; Paim, A.P.S. Study of acid digestion protocols in poly (ethylene terephthalate) resin for elementary determination by ICP OES. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves - RS, Brasil. (Apresentação: Pôster)

34. Rosa, A. J.; Oliveira, L. R. R.; Gomes, R. S.; Fernandes, A. N. Preliminary determination of potential microplastics in intake points from drinking water treatment plants. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022. (Apresentação: Pôster).

35. Sá, I.P.; Higuera, J.M.; Silva, C.A.; Nogueira, A.R.A. Assessment of As and Cd Contamination in Marine Fish by Coprecipitation-Microwave Inductively Optical Emission

Spectrometry Arrangement. In: 20<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves-RS, Brasil (Apresentação: Pôster).

36. Sá, I.P.; Santos, M.A.; Nogueira, A.R.A. Method Development for Chemical Speciation of As in seafood and Cr in agricultural samples by LC-ICP-MS. In: 20<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves-RS, Brasil (Apresentação: Oral).

37. Santos, E.M.B.; Silva, N.A.; Raimundo Jr., I.M. Determinação de sulfato em águas marinhas por espectroscopia Raman. In: VII Encontro Brasileiro de Espectroscopia Raman, 2022, Águas de São Pedro – SP, Brasil. (pôster)

38. Santos, E.M.B.; Silva, N.A.; Raimundo Jr., I.M.; Araújo, W.R. Sulfate determination in waters by Raman Spectroscopy. In: 46<sup>a</sup> Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2023, Águas de Lindóia – SP, Brasil. (pôster).

39. Santos, L. P.; Pereira, J.F.Q.; Raimundo Jr., I. M. Evaluation of glass microfiber filter as a support for the analysis of organic solvents by Laser-Induced Breakdown Spectroscopy. In: XX Encontro Nacional de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves – RS, Brasil. (pôster).

40. Serafim, W.K.M; Torres, B.S.S.; Kunst, T.H.; Silva, I.J.S.; Paim, A.P.S. Mineral composition of rice, carrots, and chayote after microwave assisted decomposition using diluted nitric acid. In: 20<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves - RS, Brasil. (Apresentação: Pôster)

41. Silva, I.J.S.; Silva, M.M.; Rocha, M.C.; Kato, M.T.; França, E.J.; Paim, A.P.S.; Gomes, M.J.F. How cooking methods and utensils affect the rice mineral content. In: 20<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves - RS, Brasil. (Apresentação: Pôster).

42. Silva, K.C.; Passos, M.S.; Vieira, I.J.C.; Canela, M. C. Multivariate triage of experimental variables using persulfate to degradation herbicides in tubular reactor' In: 45<sup>a</sup>. Reunião da Sociedade Brasileira de Química, 2022, Maceió-Al, Brasil (Apresentação de Pôster).

43. Silva, N.A. ; Raimundo Jr., I. M. Underwater determination of metal ions by Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS). In: XX Encontro Nacional de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves – RS, Brasil. (pôster). Prêmio de melhor poster.

44. Souza, J. C.; Cavalcante, J. A.; Pasquini, C.; Rohwedder, J. J. R.; Maldaner, A. O.; Hespanhol, M. C. Characterization of cocaine samples seized by the Federal Police using low-cost NIR spectrophotometers and multivariate data analysis In: 46<sup>a</sup> Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2023, Águas de Lindóia-SP, Brasil. (Apresentação: Oral e Pôster)

45. Souza, J. C.; Pasquini, C.; Hespanhol, M. C.; Rocha, F. R. P. A new approach to screening analysis using NIR spectroscopy and chemometrics applied to bulk sweeteners. In: 20<sup>o</sup> Encontro Nacional de Química Analítica e 8<sup>o</sup> Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves-RS, Brasil. (Apresentação: Pôster).



46. Souza, J. C.; Pasquini, C.; Rocha, F. R. P.; Hespanhol, M. C. A new approach to screening analysis using nir spectroscopy and chemometrics applied to bulk sweeteners In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8o CIAQA-Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022, Bento Gonçalves-RS, Brasil. (Apresentação: Pôster)
47. Vidal, C., Pasquini C. Challenges in quantitative analysis using near-infrared hyperspectral imaging (HSI-NIR): coffee purity quality control case study. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022. (Apresentação: Oral e Pôster)
48. Vitorino, G. B. L.; Oliveira, A. C.; Nascimento, C. K. S.; Pereira, J. F. Q.; Brito, A.M.S.S. Módulo de formação complementar em química aplicada: importância e perspectiva no alto sertão do pajeú In: X Semana de Química UAST/UFRPE, 2022, Serra Talhada.

## **14.6. Patentes solicitadas ou obtidas**

1. Orlando, R. M.; Nascentes, C. C.; Boratto, V. H. M. Patente depositada. Dispositivo automatizado para extração, pré- concentração e purificação de analitos com aplicação de campos elétricos e agitação magnética. Depósito: 07/07/2022. BR 13 2022 013516 8.
2. Ramos, R. O.; Lopes, W. S.; Araujo, M. C. U.; Brito, N. M. S. O.; Cavalcanti, M. T.; Oliveira, A. L.; Almeida, V. E.; Costa, A. O. Patente: Programa de Computador. Aplicação android para monitoramento de reservatórios e parâmetros de nível e climáticos via IoT. Data de registro: 19/07/2022. Número do registro: 512022001892-6. Instituição de registro: INPI - Instituto Nacional da Propriedade Industrial.
3. Ramos, R. O.; Lopes, W. S.; Martins, N. N.; Araujo, M. C. U.; Brito, N. M. S. O.; Oliveira, A. L.; Almeida, V. E.; Costa, A. O. Patente: Programa de Computador. Aplicação android para controle de um instrumento portátil destinado a análise de água. Data de registro: 19/07/2022. Número do registro: 512022001887-0. Instituição de registro: INPI - Instituto Nacional da Propriedade Industrial.
4. Ribeiro, C. C.; Orlando, R. M.; Rohwedder, J. J. R.; Rath, S. Patente concedida. Sistema automatizado para extração em fase sólida. Depósito: 19/12/2014. Concessão: 11/04/2023. BR 132014032358-8.
5. Silva, K. D.; Silva, K. D.; Lima, R. A. C.; Andrade, S. I. E.; Santos, B. H. M.; Ramos, R. O.; Araújo, M. C. U.; Lopes, W. S. Privilégio de Inovação. Nanocompósito com propriedades magnéticas e processo de síntese a partir de magnetita/pontos de carbono. Depósito: 12/09/2022. Número do registro: BR1020220182132. Instituição de registro: INPI - Instituto Nacional da Propriedade Industrial.

## **14.7. Capítulos de livros publicados**

Capítulo de Livro: Souza, G. B.; Simeone, M. L. F.; Walderrama, P.; Passarelo, V.  
Capítulo de livro. Uso da espectroscopia no infravermelho próximo como método de

análise química. In: Compêndio Brasileiro de alimentação animal, Sincronizações, 6 edição, 2023, 613-627.

Capítulo de livro: Bertoldi, C.; Gomes, R. S.; Lara, L. Z.; Machado, B. R.; Fernandes, A. N. Microplásticos em sistema de água doce: eficiência das estações de tratamento e presença em águas de abastecimento público. In: Marcelo Pompêo; Bárbara Rani-Borges; Teresa Cristina Brazil de Paiva. (Org.). Microplásticos nos ecossistemas: impactos e soluções. 1ed.São Paulo: USP, 2022, v. 8, p. 101-116.

## **14.8. Livros publicados com membros da equipe como autor, organizador ou editor**

Nada consta no período.

## **14.9. Dissertações de mestrado defendidas**

1. Danieli Sayuri Hakoyama. (2022). Dissertação de mestrado: Avaliação da potencialidade de montmorilonitas modificadas com partículas magnéticas para a extração de triazinas de meio aquoso. UFPR, Curitiba-PR. Orientador: Gilberto Abate.
2. Débora de Azevedo Domingues. 2023. Dissertação de mestrado: Montmorilonita modificada com líquido iônico em ponteira de pipeta dispersiva para extração de HPA em amostra de água marinha. Universidade Federal do Paraná, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Orientador: Marco Tadeu Grassi.
3. Fernanda Silva Soares (2022). Dissertação de mestrado: Eletrodo de pasta de carbono modificado com metalofalocianinas para determinação de estrógenos em águas para consumo humano. UFPB, João Pessoa-PB. Orientador: Mário César Ugulino de Araújo.
4. Flávia Suellen Melo de Oliveira (2022). Dissertação de mestrado: Desenvolvimento de um método analítico explorando o aumento da fluorescência de quantum dots de CdTe para determinação do ácido perfluorooctanossulfônico (PFOS) em águas UFPE, Recife-PE. Orientadora: Ana Paula Silveira Paim
5. Isabela Camargo Gonçalves (2023). Dissertação de mestrado: Desenvolvimento de estratégias analíticas limpas para a determinação de proteína e ureia em alimentos. USP, Piracicaba-SP. Orientador: Fábio R. P. Rocha.
6. Leticia Cristina da Silva. (2023). Dissertação de mestrado: Liberação de microfibras têxteis por lavagem de roupas: Caracterização e estudo preliminar da interação com contaminantes emergentes. UFPR, Curitiba-PR. Orientador: Gilberto Abate.
7. Luís Claudio Martins (2023). Dissertação de mestrado: Procedimentos analíticos baseados em imagens digitais e microextração líquido-líquido para a determinação de flavonóis em frutas. USP, Piracicaba-SP. Orientador: Fábio R. P. Rocha.

8. Maria Fernanda Araujo Vieira Matos (2023). Dissertação de mestrado: Métodos para a determinação de N-nitrosaminas em água e esmaltes de unhas. UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Susanne Rath. 28 de fevereiro de 2023.
9. Mariane Pimentel Felix da Silva Fonseca (2022). Dissertação de mestrado: Determinação de Cd, Co, Cu, Fe, Mn, Ni, Pb, V e Zn em amostras de petróleo provenientes do derramamento no litoral de Pernambuco. UFPE, Recife-PE. Orientadora: Ana Paula Silveira Paim
10. Michele Christine Woo. (2022). Dissertação de mestrado: Potencialidade de aplicação de vermiculita silanizada como sorvente para extração de contaminantes de meio aquoso. UFPR, Curitiba-PR. Orientador: Gilberto Abate.
11. Pedro Gabriel Correia de Lucena (2022). Dissertação de mestrado: Uso de técnicas espectroscópicas e quimiométricas para reconhecimento de padrões e predição de parâmetros de solos tropicais sob diferentes condições climáticas. UFPE, Recife-PE. Orientadora: Claudete Fernandes Pereira
12. Suzane Cristina Fidelis (2022). Dissertação de mestrado profissional: “Alternativas analíticas para o preparo e desenvolvimento de procedimentos na determinação de micronutrientes em fertilizantes minerais mistos por espectrometria de emissão óptica com plasma induzido por micro-ondas (MIP OES)”. Universidade Federal de São Carlos, São Carlos SP. Orientador: Ana Rita de Araujo Nogueira.

#### **14.10. Dissertações de mestrado em andamento**

1. Ana Flávia Loureiro Martins Nascimento (em andamento). Dissertação de mestrado: Avaliação de nanopartículas de ouro sintetizadas em ring oven para a intensificação de sinais de emissão em LIBS. Unicamp, Campinas-SP. Orientador: Ivo M. Raimundo Jr.
2. Augusto Fernando Souza de Oliveira (em andamento). Dissertação de mestrado: Sensores para a determinação de espécies de interesse ambiental com detecção no infravermelho próximo. Unicamp, Campinas-SP. Orientador: Ivo M. Raimundo Jr.
3. Daniele Gama Rodrigues (em andamento). Dissertação de mestrado: Desenvolvimento de nanosensor fluorimétrico para a determinação de oxigênio dissolvido. Unicamp, Campinas-SP. Orientador: Ivo M. Raimundo Jr.
4. Elisa Mayra Barbosa dos Santos (em andamento). Dissertação de mestrado: Determinação de sulfato em água produzida por espectroscopia Raman. Unicamp, Campinas-SP. Orientador: Ivo M. Raimundo Jr.
5. Fabiane Ferraz Wisniewski. (em andamento). Dissertação de mestrado: Estudos de sorção de contaminantes de relevância ambiental em microplásticos (MPs) e avaliação da presença de MPs em águas superficiais. UFPR, Curitiba-PR. Orientador: Gilberto Abate.
6. Hellen Gonçalves Vieira (em andamento). Dissertação de mestrado: Avaliação de microplásticos e compostos fluorados em ambientes internos e externos.

Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro, Campos dos Goytacazes-RJ Orientador: Maria Cristina Canela

7. Jennifer Alves Cavalcante (em andamento). Dissertação de mestrado: Desenvolvimento de método para a caracterização de ecstasy e suplementos alimentares baseados em espectroscopia de infravermelho próximo (NIR). Orientador: Jarbas J. R. Rohwedder.
8. Jéssica Bruna de Lima (em andamento). Dissertação de mestrado: Monitoramento de contaminantes inorgânicos em pescados e águas de rios do estado de Pernambuco afetados pelo derrame de óleo. UFPE, Recife-PE. Orientadora: Ana Paula Silveira Paim e Mara José de Filgueiras Gomes.
9. João Vítor Medeiros Mariz (em andamento). Dissertação de mestrado: Sistemas no contexto tecnológico 4.0 para o controle e monitoramento remoto de águas do semiárido. Orientador: Mário César Ugulino de Araújo.
10. Karen Noda Morishita (em andamento). Dissertação de mestrado: Sorção de pesticidas em microplástico de poliestireno em diferentes matrizes ambientais. UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Cassiana C. Montagner.
11. Kleiton C. Cunha (em andamento). Dissertação de mestrado: Estudos de estabilidade de eletrodos de referência utilizados na área de corrosão. UFRJ, Rio de Janeiro-RJ. Orientador: Fabiano B. Gonzaga.
12. Leonardo Granero Gonçalves (em andamento). Dissertação de mestrado: Desenvolvimento de um turbidímetro/nefelômetro para a determinação de sólidos totais dissolvidos em água produzida. Unicamp, Campinas-SP. Orientador: Ivo M. Raimundo Jr.
13. Letícia Premoli Foli. (em andamento). Dissertação de mestrado: Aplicação da espectroscopia no infravermelho próximo para química forense. Universidade Federal de Viçosa Universidade Federal de Viçosa, Viçosa-MG. Orientadora: Maria do Carmo Hespanhol.
14. Lorena Lima da Silva (em andamento). Dissertação de mestrado: Caracterização da presença de nutrientes e contaminantes de amostras de peixes, crustáceos e ostras coletados na região do Baixo rio São Francisco como subsídio a elaboração de indicadores para auxiliar políticas públicas na região. Universidade Federal de São Carlos, São Carlos SP. Orientador: Ana Rita de Araujo Nogueira.
15. Luan Sandre da Silva. (em andamento). Dissertação de mestrado: Reaproveitamento de cobre oriundo da produção de grafeno. Universidade Federal de Viçosa Universidade Federal de Viçosa, Viçosa-MG. Orientadora: Maria do Carmo Hespanhol.
16. Marcelo Larsen de Lima Tozo (em andamento). Dissertação de mestrado: Feijão guandu para aplicação em alimentos: caracterização quanto à composição, funcionalidade e atributos sensoriais. Universidade Federal de São Carlos, São Carlos SP. Orientador: Ana Rita de Araujo Nogueira.
17. Paulo Cauás Tenório (em andamento). Dissertação de mestrado: Desenvolvimento de método analítico baseado em infravermelho para determinação de

drogas utilizadas na facilitação de crimes de violação. UFPE, Recife-PE. Orientadora: Claudete Fernandes Pereira

18. Priscilla da Costa Cunha Alves (em andamento). Dissertação de mestrado: Determinação de edulcorantes em águas superficiais e efluentes usando SPE-UHPLC-MS/MS. UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Susanne Rath.

19. Raissa Tandara M. dos Santos (em andamento). Dissertação de mestrado: Desenvolvimento de procedimento analítico para determinação de furfurais em cafés utilizando fotometria por imagens digitais. USP, Piracicaba-SP. Orientador: Fábio R. P. Rocha.

20. Rita de Cassia Malho Alves (em andamento). Dissertação de mestrado: Determinação de lactose em leite explorando fotometria por imagens digitais obtidas por um smartphone. USP, Piracicaba-SP. Orientador: Fábio R. P. Rocha.

21. Sabrina Poliana de França (em andamento). Dissertação de mestrado profissional: "Validação de Métodos de Preparo e Determinação de Lixiviados Metálicos Provenientes de Processos de Corrosão". UFSCar, São Carlos, SP. Orientador: Ana Rita de Araujo Nogueira

22. Stephanie, V. Porto. (em andamento). Dissertação de mestrado: Análise do perfil de voláteis em cervejas Pilsen utilizando cromatografia gasosa acoplada a detectores por ionização em chama e espectrômetro de massas. DQ-UFMG-MG CoOrientador: Bruno G. Botelho. Orientador: Ricardo M. Orlando.

23. Tássio de Araújo Nunes (em andamento). Dissertação de mestrado: Estudo eletroquímico e eletroanalítico de N-nitrosaminas. Orientador: Mário César Ugolino de Araújo.

24. Thaís Silva Soares. (em andamento). Dissertação de mestrado: Partição líquido-líquido de analitos estratégicos em sistema contendo solvente eutético. Universidade Federal de Viçosa Universidade Federal de Viçosa, Viçosa-MG. Orientadora: Maria do Carmo Hespagnol.

25. Vanessa Fontana Fonseca (em andamento). Dissertação de Mestrado: Microplásticos em águas estuarinas: distribuição espaçotemporal e contaminantes associados. UFRGS, Porto Alegre-RS. Orientadora: Andreia Neves Fernandes. Co-Orientadora: Crislaine F. Bertoldi.

26. Victor Zeferino e Resende (em andamento). Dissertação de mestrado: Avaliação da degradação de termoplásticos em condições ambientais. UNICAMP, Campinas-SP. Orientadora: Cassiana C. Montagner.

27. Vinicius Sarracini Santos (em andamento). Dissertação de mestrado: Microplásticos e contaminantes emergentes em águas superficiais: usos das bacias hidrográficas e os impactos no ambiente. UNICAMP, Campinas-SP. Orientadora: Cassiana C. Montagner.

28. Wellerson K. N. Macedo. (em andamento). Dissertação de mestrado: Análise comparativa de espectrômetros NIR para a determinação do estágio ideal de maturação para a colheita de mangas 'Palmer'. UNIVASF, Petrolina, PE. Orientador: Sérgio Tonetto de Freitas.

### 14.11. Teses de doutorado defendidas

1. Chrys Katielli Hoinacki da Silva (2022). Tese de doutorado: Resíduos agroindustriais como suportes para imobilização de lacase para aplicação na remoção e degradação de fármacos. UFRGS, Porto Alegre-RS. Orientador: Andreia Neves Fernandes. Co-Orientadora: Roberta Bussamara.
2. Cláudia Jéssica Cavalcanti (2022). Tese de doutorado: Simulação e otimização de processos para obtenção de biocombustíveis: etanol, bioquerosene de aviação e diesel verde. UFPE, Recife – PE. Orientadora: Maria Fernanda Pimentel.
3. Cristiane Vidal (2022). Tese de doutorado: Identificação de microplásticos no ambiente e detecção de impurezas em café por imageamento hiperespectral na região do infravermelho próximo (HSI-NIR) e quimiometria. UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Celio Pasquini.
4. Herick Macedo Santos (2022). Tese de doutorado: Estratégias analíticas para avaliação da bioacessibilidade e biodisponibilidade in vitro de elementos essenciais e arsênio em amostras de peixe e camarão Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP. Orientador: Ana Rita de Araujo Nogueira.
5. Jéssyca Ferreira de Medeiros (2022). Tese de Doutorado: Avaliação da remoção de pesticidas visando o reuso potável da água: Estudo em escala piloto. UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Cassiana C. Montagner.
6. Kaíque Augusto Moreira Lourenço Cruz. (2023) Tese de Doutorado: Uso da calibração multi-energia para a quantificação de elementos em lixiviado de baterias níquel metal hidreto e recuperação de lantanídeos com alta pureza utilizando solvente eutético hidrofóbico. Universidade Federal de Viçosa, Viçosa-MG. Orientadora: Maria do Carmo Hespanhol.
7. Luis Fernando Amorim Batista. (2023) Tese de doutorado: Síntese e avaliação de espumas de poliuretano como material sorvente para a extração em fase sólida de triazinas em matrizes aquosas. UFPR, Curitiba-PR. Orientador: Gilberto Abate.
8. Rafael Luis Ribessi. (2023) Tese de doutorado: Aplicação de espectroscopias vibracionais na análise de espécies gasosas. UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Jarbas J. R. Rohwedder.
9. Raphael D’Anna Acayaba (2022). Tese de Doutorado: Segurança Hídrica: um olhar sobre os impactos do uso e ocupação de solos sobre a qualidade de águas superficiais. UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Cassiana C. Montagner.
10. Samara Soares (2023). Tese de doutorado: Avaliação de estratégias de calibração, imagens digitais e análises em fluxo para o controle de qualidade de biodiesel, doutorado. USP, Piracicaba-SP. Orientador: Fábio R. P. Rocha.
11. Valber Elias de Almeida (2022). Tese de doutorado: Seleção de escores baseados no poder de discriminabilidade em análise discriminante linear. UFPB, João Pessoa-PB. Orientador: Mário César Ugulino de Araújo.



## 14.12. Teses de doutorado em andamento

1. Abinoan da Silva Rodrigues (em andamento). Tese de doutorado: Avaliação do perfil químico de amostras de petróleo e peixe proveniente de derrame de óleo no litoral pernambucano. Universidade Federal de Pernambuco, UFPE, Recife-PE. Orientador: Ana Paula Silveira Paim. Coorientador: José Licarion Pinto Segundo Neto.
2. Adriana Lucena de Sales (em andamento). Tese de doutorado: Fases extratoras para a determinação de cobre e manganês por Espectroscopia de Emissão Óptica com Plasma Induzido por Laser (LIBS). Unicamp, Campinas-SP. Orientador: Ivo M. Raimundo Jr.
3. Aline Coelho Fonseca (em andamento). Tese de doutorado: Identificação de vestígios de sangue humano depositados em diferentes substratos e envelhecidos em tempos diferentes utilizando espectroscopia e imagem no infravermelho e técnicas quimiométricas. UFPE, Recife – PE. Orientadora: Maria Fernanda Pimentel
4. Beatriz De Caroli Vizioli (em andamento). Tese de doutorado: Avaliação da influência do preparo de amostra em plásticos degradados em condições laboratoriais e ambientais semi controladas. UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Cassiana C. Montagner.
5. Bruno Henrique da Silva Melo (em andamento). Tese de doutorado: Desenvolvimento de soft-sensors e modelos de aprendizagem de máquinas aplicados à indústria sucroalcooleira. UFPE, Recife – PE. Orientadora: Maria Fernanda Pimentel
6. Darlei Gutierrez Dantas Bernardo Oliveira (em andamento). Tese de doutorado: Métodos não destrutivos para predição germinativa e vigor de sementes de algodão. . UFPE, Recife – PE. Orientadora: Maria Fernanda Pimentel. Coorientador: Everaldo Paulo de Medeiros
7. Ellen de Souza Almeida Duarte (em andamento). Tese de doutorado: Microplásticos em águas urbanas: avaliação do perfil de degradação e contaminantes associados. UFRGS, Porto Alegre-RS. Orientadora: Andreia Neves Fernandes. Co-Orientadora: Crislaine F. Bertoldi.
8. Erklaylle Gabriely Custodio da Silva. (em andamento). Tese de doutorado: Avaliação do envelhecimento artificial e natural do papel para datar e determinar falsificações de documentos utilizando espectroscopia vibracional e técnicas quimiométricas. UFPE, Recife – PE. Orientadora: Maria Fernanda Pimentel
9. Felipe Cunha da Silva Trindade (em andamento). Tese de doutorado: Espectroscopia de Absorção no Infravermelho Intensificada por Superfície (SEIRA) com quantum dots e acessório de reflectância Total Atenuada (ATR) de Reflexão Única. UFPE, Recife-PE. Orientadora: Claudete Fernandes Pereira
10. Flávio Montenegro de Andrade (em andamento). Tese de doutorado: Desenvolvimento de métodos analíticos para caracterização de bio-óleo empregando técnicas quimiométricas. UFPE, Recife – PE. Orientadora: Maria Fernanda Pimentel

11. Gabriel Martins Fernandes (em andamento). Tese de doutorado: Métodos analíticos explorando imagens digitais e arranjos optoeletrônicos para a avaliação do processo de produção e de qualidade de cachaça, doutorado. USP, Piracicaba-SP. Orientador: Fábio R. P. Rocha.
12. Hugo Sarmiento Vela (em andamento) Tese de doutorado: Detecção de amônia no ar atmosférico empregando e GC-MS. Universidade Federal do Paraná, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Orientador: Marco Tadeu Grassi.
13. Jaime S. Viana (em andamento) Tese de doutorado: Eletroextração multifases de grandes volumes para determinação de contaminantes em leite bovino. DQ-UFMG-MG. Coorientador: Ricardo. M. Orlando. Orientador: Bruno G. Botelho, B. G.
14. Jamille Carvalho de Souza (em andamento) Tese de doutorado: Elaboração de métodos analíticos visando a identificação de drogas ilícitas em laboratório e em campo empregando espectroscopia do infravermelho próximo (NIR). Universidade Federal de Viçosa, Viçosa-MG. Orientadora: Maria do Carmo Hespagnol.
15. Jasciane da Silva Alves (em andamento) Tese de doutorado: Aplicação da espectroscopia do infravermelho próximo (NIR) na previsão e detecção de espécies do gênero *Colletotrichum* em mangas produzidas no Vale do São Francisco. Rede Nordeste de Biotecnologia – Programa de Pós-graduação em Biotecnologia, Recife-PE. Co-orientador: Sérgio Tonetto de Freitas.
16. Jessica Stival (em andamento) Tese de doutorado: Avaliação ambiental, identificação e quantificação de microplásticos em águas naturais e suas interações com espécies metálicas. Universidade Federal do Paraná, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Orientador: Marco Tadeu Grassi.
17. João Henrique Feranandes da Silva (em andamento). Tese de doutorado: Secagem convectiva de banana pré-tratada assistida por técnicas não térmicas: estudo experimental por imagem hiperespectral. UFPE, Recife-PE. Coorientador: Fernanda A. Honorato
18. José Marcelino de Souza Netto (em andamento). Tese de doutorado: Métodos baseados em equipamentos portáteis e imagens na região NIR para autenticidade da farinha de amêndoa e monitoramento do processamento de tabaco. 2020. UFPE, Recife – PE. Orientadora: Maria Fernanda Pimentel. Co-orientadora: Fernanda Honorato
19. Julieth Gonzalez Herrera (em andamento). Tese de doutorado: Desenvolvimento de métodos para controle de qualidade de canabinoides em extratos medicinais de Cannabis. UFPE, Recife – PE. Orientadora: Maria Fernanda Pimentel. Coorientador: Ricardo S. Honorato.
20. Kaique Carvalho da Silva (em andamento). Tese de doutorado: Aporte de microplásticos através do Rio Paraíba do Sul: análise em água e areias na zona costeira. Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro, Campos dos Goytacazes-RJ. Orientador: Maria Cristina Canela

21. Larissa Zacher Lara (em andamento). Tese de doutorado: Liberação de fibras de roupas em função do uso. UFRGS, Porto Alegre-RS. Orientadora: Andreia Neves Fernandes. Co-Orientador: Walter Ruggeri Waldman.
22. Layla Paixão Santos (em andamento). Tese de doutorado: Avaliação da razão isotópica  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  em combustíveis fósseis e biocombustíveis. Unicamp, Campinas-SP. Orientador: Ivo M. Raimundo Jr.
23. Luciano Bernardo Ramo (em andamento). Tese de doutorado: Desenvolvimento de metodologias analíticas verdes baseadas em imagens digitais e quimiometria para avaliação da qualidade de produtos alimentícios. UFPB, João Pessoa-PB. Orientador: Mário César Ugulino de Araújo.
24. Mariana Amaral Dias (em andamento). Tese de doutorado: Microplásticos de poliamida e poli(tereftalato de etileno) como vetores de contaminantes em sistemas aquáticos. UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Cassiana C. Montagner.
25. Mayara Bitencourt Leão (em andamento). Tese de doutorado: Nanomateriais tridimensionais baseados em grafeno e decorados com nanopartículas para aplicação na detecção de contaminantes emergentes em água. UFRGS, Porto Alegre-RS. Orientadora: Andreia Neves Fernandes. Co-Orientadora: Carolina Ferreira De Matos Jauris.
26. Mayara Padovan dos Santos. (em andamento) Tese de doutorado: Comportamento, distribuição e biodisponibilidade de germânio em ambientes aquáticos. Universidade Federal do Paraná, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Orientador: Marco Tadeu Grassi.
27. Miraldo Santos (em andamento). Tese de doutorado: Fármacos em águas superficiais e efluente tratado de esgoto: Avaliação de risco para a vida aquática e ocorrência em água de rio, ocorrência e remoção por processos avançados em efluente tratado de esgoto. UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Cassiana C. Montagner.
28. Morgana de Souza Camargo (em andamento) Tese de doutorado: Biocarvões como fase sortiva de contaminantes emergentes em dispositivos o-DGT. Universidade Federal do Paraná, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Orientador: Marco Tadeu Grassi.
29. Mykaelli Andrade Santos (em andamento). Tese de doutorado: Análise exploratória de metaloproteômica em tecido ruminal, músculo e fígado de bovinos da raça Nelore (*Bos taurus indicus*) visando associação com microbiomas do rúmen e intestino. Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP. Orientador: Ana Rita de Araujo Nogueira.
30. Nilvan Alves da Silva (em andamento). Tese de doutorado: Determinação de metais alcalino-terrosos em águas marinhas por Espectrometria de Emissão Óptica em Plasma Induzido por Laser. Unicamp, Campinas-SP. Orientador: Ivo M. Raimundo Jr.
31. Pascoal Francisco Nhamue (em andamento). Tese de doutorado: Desenvolvimento de procedimentos para a determinação de nutrientes em fertilizantes de eficiência aumentada e contaminantes em fertilizantes minerais e orgânicos.

Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP. Orientador: Ana Rita de Araujo Nogueira.

32. Priscila Karachinski dos Reis. (em andamento) Tese de doutorado: Avaliação de procedimentos de extração em fase sólida baseados em carvões ativados modificados magneticamente para a determinação de contaminantes de preocupação emergente. UFPR, Curitiba-PR. Orientador: Gilberto Abate.

33. Raimara de Souza Gomes (em andamento). Tese de doutorado: Microplásticos oxibiodegradáveis: interação com fármacos e efeitos toxicológicos. UFRGS, Porto Alegre-RS. Orientadora: Andreia Neves Fernandes. Co-Orientador: Walter Ruggeri Waldman.

34. Rossana Oliveira da Nóbrega (em andamento). Tese de doutorado: Desenvolvimento de metodologias analíticas verdes baseadas em imagens digitais, espectroscopia NIR e quimiometria para avaliação da qualidade de produtos alimentícios e farmacêuticos. Orientador: Mário César Ugulino de Araújo.

35. Samara Banhos (em andamento). Tese de doutorado: Determinação de mercúrio em tilápia e camarão: teores totais e especiação química. Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP. Orientador: Ana Rita de Araujo Nogueira.

36. Ueslei Giori Favero. (em andamento) Tese de doutorado: Extração líquido-líquido utilizando solvente eutético. Universidade Federal de Viçosa, Viçosa-MG. Orientadora: Maria do Carmo Hespanhol.

37. Victor de Souza Pereira (em andamento). Biomassa de resíduos agroindustriais de frutas associadas a técnicas de impregnação e secagem para a elaboração de snacks enriquecidos com ferro. UFPE, Recife-PE. Orientador: Fernanda A. Honorato

38. Vinícius Diniz (em andamento). Tese de doutorado: Avaliação do carvão ativado no pós-tratamento do efluente da Estação Produtora de Água de Reuso. UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Susanne Rath. (Orientador estágio sanduiche: Colin R. Crick da Queen Mary University of London, Reino Unido).

39. Vitor Dantas Alves (em andamento). Tese de doutorado: Espectroscopias Raman e infravermelho intensificadas por superfície na análise de alimentos. UFPE, Recife-PE. Orientadora: Claudete Fernandes Pereira.

### **14.13. Supervisões de pós-doutorado em andamento**

1. Crislaine Bertoldi (em andamento). Projeto de pós-doutorado: Determinação de microplásticos em amostras de fertilizante industrial. UFRGS, Porto Alegre-RS. Supervisora: Andreia Neves Fernandes.

2. Gabriela Freitas Pereira de Souza (em andamento). Projeto de pós-doc: Avaliação do metabolismo e cinética de depleção de resíduos com insumos farmacêuticos ativos radiomarcados em peixes. UNICAMP, Campinas-SP. Supervisora: Susanne Rath.

3. Ivero Pita de Sa (em andamento). Projeto de pós-doc (CNPq): Título projeto: Alterações químicas em amostras de saliva de vacas leiteiras: Um estudo piloto para avaliar técnica não invasiva de diagnóstico. Embrapa Pecuária Sudeste, São Carlos - SP. Supervisor: Ana Rita de Araujo Nogueira.
4. Jicarla P. Rebouças (em andamento). Projeto de pós-doc: Desenvolvimento de um espectrômetro de emissão no infravermelho próximo com transformada de Fourier (FTNIREs) e sua aplicação na determinação da qualidade e/ou detecção de fraudes em produtos agropecuários, análise de óxidos minerais e amostras ambientais. Unicamp, Campinas-SP. Supervisor: Ivo M. Raimundo Jr.
5. Kaíque Augusto Moreira Lourenço Cruz (em andamento). Projeto de pós-doc: Espectroscopia no infravermelho próximo para análise de amostras de agrotóxico. Universidade Federal de Viçosa, Viçosa-MG. Supervisora: Maria do Carmo Hespagnol.
6. Ligia Maria Salvo de Morales (em andamento). Projeto de pós-doc: Avaliação da atividade estrogênica de contaminantes emergentes no sistema de reúso potável direto da Estação de Tratamento de Esgoto Capivari II, Campinas. UNICAMP, Campinas-SP. Supervisora: Susanne Rath.
7. Nattany Tayany Gomes de Paula (em andamento). Projeto de pós-doc: Emprego de eletroluminescência para determinar contaminantes em alimentos. Universidade Federal de Pernambuco, Recife-PE. Supervisora: Ana Paula Silveira Paim.
8. Rafael Garrett Dolatto (em andamento). Projeto de pós-doc: Determinação de HPA em pescado: desenvolvimento analítico e aplicação. Universidade Federal do Paraná, Curitiba-PR. Supervisor: Marco Tadeu Grassi.
9. Rafaella de Figueiredo Sales (em andamento). Projeto de pós-doc: Espectroscopia de infravermelho e de técnicas de aprendizado de máquina em estratégias de tecnologias analíticas de processo e na discriminação de gasolinas. UFPE, Recife – PE. Supervisora: Maria Fernanda Pimentel.
10. Samara Soares (em andamento). Projeto de pós-doc: Aplicações inovadoras de solventes eutéticos em emissão óptica induzida por laser, espectrofluorimetria, fotometria por imagens digitais e microextrações em fluxo. USP, Piracicaba-SP. Supervisor: Fábio R. P. Rocha.

#### **14.14. Iniciação científica - Orientações concluídas**

1. Aghata de Campos Martineli (2022). Iniciação científica: Determinação de lactoperoxidase em leite explorando imagens digitais obtidas por um smartphone. USP, Piracicaba-SP. Orientador: Fábio R. P. Rocha.
2. Daniel Carvalho Neto. (2022). Iniciação científica: Microplásticos em sistemas aquáticos: um estudo de caso no Ribeirão das Pedras, Campinas (SP). PIBIC: 2021/2022. UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Cassiana C. Montagner.
3. Isabela da Costa de Lima. (2022). Iniciação científica: Tratamento de corantes presentes nos efluentes da indústria têxtil. PIBIC: 2021/2022. UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Cassiana C. Montagner.

4. Jaqueline Rosa da Silva. (2022). Iniciação Científica: Microplásticos em Matrizes Aquosas: Efeito dos Principais Parâmetros Envolvidos no Processo de Extração. UFRGS, Porto Alegre-RS. Orientador: Andreia Neves
5. Laura Rodrigues Reischak de Oliveira (2022). Iniciação Científica: Microplásticos em águas de abastecimento de Porto Alegre e Região Metropolitana. UFRGS, Porto Alegre-RS. Orientador: Andreia Neves Fernandes
6. Leonardo Saulo Pereira Alves (2022). Iniciação científica: Extração de metais críticos utilizando sistema bifásico hidrofóbico. Universidade Federal de Viçosa Universidade Federal de Viçosa, Viçosa-MG. Orientadora: Maria do Carmo Hespanhol.
7. Raiza Lanzotti Landgraf (2023). Iniciação científica: Determinação de macro e micro nutrientes em ração de peixe empregando técnicas de plasma. Universidade Federal de São Carlos, São Carlos SP. Orientador: Ana Rita de Araujo Nogueira.
8. Ramon Domingues dos Santos. (2022). Iniciação científica: Ocorrência de microplásticos em Estações de Tratamento de Esgoto. PIBIC: 2021/2022. UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Cassiana C. Montagner.
9. Victor Souza Teixeira (2022). Iniciação científica: Lixiviação verde de metais presentes em baterias descartadas com solvente eutético profundo. Universidade Federal de Viçosa Universidade Federal de Viçosa, Viçosa-MG. Orientadora: Maria do Carmo Hespanhol.

#### **14.15. Iniciação científica - orientações em andamento**

1. Amauri Garcia Filho (em andamento). Iniciação científica: Preparo de amostras e análise de minerais em rações de peixes. Universidade Federal de São Carlos, São Carlos SP. Orientador: Ana Rita de Araujo Nogueira.
2. Ana Clara Pereira Anneli (em andamento). Iniciação científica: Efeito de carvão hidrotérmico na regeneração de solos para o cultivo de tomate. UNESP, São José do Rio Preto-SP. Márcia Cristina Bisinoti.
3. André José da Rosa (em andamento). Iniciação científica. Ocorrência, distribuição e fontes de microplásticos de águas superficiais da região metropolitana de Porto Alegre. UFRGS, Porto Alegre-RS. Orientador: Andreia Fernandes.
4. Anthony Cesar Soares Castanha (em andamento). Iniciação científica: Síntese hidrotermal e biconjugação de carbon dots para desenvolvimento de método multiproduto para determinação fluorimétrica de raticidas anticoagulantes de segunda geração. UFPE, Recife-PE. Orientadora: Ana Paula Silveira Paim. Co-orientação: Nattany Tayany Gomes de Paula
5. Beatriz Ariane Casagrande (em andamento). Iniciação científica: Efeito de arbolina e carvão hidrotérmico na fertilidade de solos para o cultivo de alface. UNESP, São José do Rio Preto-SP. Márcia Cristina Bisinoti.



6. Bianca Bacellar Rodrigues de Godoy (em andamento). Iniciação científica: Determinação do teor alcoólico em kombuchas explorando fotometria por imagens digitais USP, Piracicaba-SP. Orientador: Fábio R. P. Rocha.
7. Brenda Oliveira Lopes de Menezes (em andamento). Iniciação científica: Obtenção de solventes eutéticos profundos hidrofílicos. Universidade Federal de Viçosa Universidade Federal de Viçosa, Viçosa-MG. Orientadora: Maria do Carmo Hespanhol.
8. Cláudio Zaccani (em andamento). Iniciação Científica: Microplásticos em amostras de fertilizantes industriais. UFRGS, Porto Alegre-RS. Orientador: Andreia Neves Fernandes.
9. Estevão Camillo da Costa (em andamento). Iniciação científica: Aplicação da tecnologia NIRs em instrumentos portáteis como ferramenta diagnóstica do parasitismo por nematóides gastrointestinais em ovinos. Centro Universitário Central Paulista (UNICEP), São Carlos SP. Orientador: Ana Rita de Araujo Nogueira.
10. Gabriel dos Santos Souza Martins. (em andamento). Iniciação científica: Identificação de não conformidade de materiais utilizando espectroscopia de infravermelho próximo. Universidade Federal de Viçosa Universidade Federal de Viçosa, Viçosa-MG. Orientadora: Maria do Carmo Hespanhol.
11. Giovanna Marcolan Zamberlan (em andamento) Iniciação científica: Microplásticos em águas de abastecimento de Porto Alegre e Região Metropolitana. UFRGS, Porto Alegre-RS. Orientador: Andreia Fernandes.
12. Agata Cristia Martins (em andamento). Iniciação Científica: Determinação de HPA e BTEX em pescado: desenvolvimento analítico e aplicação em amostras do Nordeste do Brasil. UFPR, Curitiba PR. Orientador: Marco Tadeu Grassi.
13. João Pedro Cardoso da Silva (em andamento). Iniciação científica: Determinação de metais em amostras de vinagres comercializados na região metropolitana de Recife. UFPE, Recife-PE. Orientadora: Ana Paula Silveira Paim.
14. José Matheus Silva Rodrigues (em andamento). Iniciação científica: Desenvolvimento de métodos baseados na espectroscopia NIR para caracterização de bio-óleo na produção por liquefação hidrotérmica. UFPE, Recife- PE. Orientadora: Maria Fernanda Pimentel
15. Jossemyller Ferreira Damascena (em andamento). Iniciação científica: Dissolução amigável de metais a partir de resíduos utilizando ácidos orgânicos e/ou solvente eutético hidrofílico. Universidade Federal de Viçosa Universidade Federal de Viçosa, Viçosa-MG. Orientadora: Maria do Carmo Hespanhol.
16. Kamyla Dornelles Cruz (em andamento). Iniciação científica: Microplásticos em água bruta em manancial de abastecimento de Porto Alegre e Região Metropolitana. UFRGS, Porto Alegre-RS. Orientador: Andreia Fernandes
17. Lucas Rodrigues Ferreira Guimarães Tavares (em andamento). Iniciação científica. Desenvolvimento de método analítico baseado na Espectroscopia de Absorção no Infravermelho Intensificada por Superfície (SEIRA) para análise de melamina. UFPE, Recife-PE. Orientadora: Claudete Fernandes Pereira

18. Luiz Felipe Lobo de Oliveira (em andamento). Iniciação científica: Avaliação de microplásticos e contaminantes emergentes nas águas do Rio Paraíba do Sul. Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro, Campos dos Goytacazes-RJ. Orientador: Maria Cristina Canela
19. Marcos André de Souza Araújo (em andamento). Iniciação científica: Análise de microplásticos no trato gastrointestinal de elasmobrânquios e robalos na Região Norte Fluminense. 2023. Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro, Campos dos Goytacazes-RJ Orientador: Maria Cristina Canela
20. Maria Fernanda Valladão Santana. (em andamento). Iniciação científica: Extração de metais de transição utilização solvente eutético profundo. Universidade Federal de Viçosa Universidade Federal de Viçosa, Viçosa-MG. Orientadora: Maria do Carmo Hespagnol.
21. Pedro Miguel Cabrera (em andamento). Iniciação Científica: Microplásticos de poliamida e 17 $\beta$ -estradiol em sistemas aquosos: estudo de competição nas interações na presença de matéria orgânica. Iniciação científica: Orientador: Andreia Neves Fernandes.
22. Ramon Domingues dos Santos (em andamento). Iniciação científica: Avaliação antrópica dos níveis de microplásticos e contaminantes emergentes em bacias hidrográficas urbanas. FAPESP 2022/09112-5. UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Cassiana C. Montagner.
23. Thiago Costa Messias (em andamento). Desenvolvimento de método e análise de amostras ambientais visando a quantificação de antimicrobianos empregados na piscicultura. UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Susanne Rath.
24. Vitor Manuel Oliveira da Silva. (em andamento). Iniciação científica: Obtenção de solventes profundos hidrofóbicos. Universidade Federal de Viçosa Universidade Federal de Viçosa, Viçosa-MG. Orientadora: Maria do Carmo Hespagnol.
25. Ygor Ribeiro Guimarães. (em andamento). Iniciação científica: Recuperação de cobre a partir de resíduos. Universidade Federal de Viçosa Universidade Federal de Viçosa, Viçosa-MG. Orientadora: Maria do Carmo Hespagnol.

**APÊNDICE I**

Lista atualizada em 01/07/2023 dos pesquisadores do INCTAA

<b>PESQUISADORES INCTAA</b>	<b>SIGLA DA INSTITUIÇÃO</b>
Adriane Medeiros Nunes	UFPeI
Adriano Otávio Maldaner	PF-DF
Alexandre Fonseca	UnB
Aline Camarão Telles Biasoto	EMBRAPA Semi árido - Petrolina-PE
Ana Cristi Brasile Dias	UnB
Ana Paula Silveira Paim	UFPE
Ana Rita de Araújo Nogueira	EMBRAPA Pecuária Sudeste-SP
Anderson Schwingel Ribeiro	UFPeI
Anderson Silva Soares	UFG
Andréa Monteiro Santana Silva	UFRPE - ST
Andreia Neves Fernandes	UFRGS
Boaventura Freire dos Reis	USP - CENA
Cassiana Carolina Montagner Raimundo	UNICAMP
Celio Pasquini	UNICAMP
Clarimar José Coelho	UCG
Claudete Fernandes Pereira	UFPE
Cláudia de Oliveira Cunha	UFPB
Cristiane Vidal	UNICAMP
Daniela Domingues	Braskem
Everaldo Paulo de Medeiros	EMBRAPA ALGODÃO-PE
Fabiano Barbieri Gonzaga	INMETRO
Fábio Rodrigo Piovezani Rocha	USP - CENA
Fernanda Araújo Honorato	UFPE
Fernanda Vasconcelos de Almeida	UnB
Fernando Fabríz Sodré	UnB
Gilberto Abate	UFPR
Gilberto Batista de Souza	EMBRAPA Pecuária Sudeste-SP
Gisele Simone Lopes	UFC
Ivo Milton Raimundo Junior	UNICAMP
Jarbas Jose Rodrigues Rohwedder	UNICAMP
João Paulo Saraiva Morais	EMBRAPA ALGODÃO-PE
José Roberto Guimarães	UNICAMP
Katia Messias Bichinho	UFPB
Lívia Paulia Dias Ribeiro	UNILAB
Márcio das Virgens Rebouças	Braskem

<b>PESQUISADORES INCTAA</b>	<b>SIGLA DA INSTITUIÇÃO</b>
Marco Tadeu Grassi	UFPR
Maria Cristina Canela	UENF
Maria do Carmo Hespanhol da Silva	UFV
Maria Fernanda Pimentel	UFPE
Maria Lucia Ferreira Simeone	EMBRAPA Sorgo e Milho-MG
Mariana Antunes Vieira	UFPeI
Mario Cesar Ugulino de Araujo	UFPB
Mauro Korn	UNEB
Pedro Sergio Fadini	UFSCar
Ricardo Mathias Orlando	UFMG
Ricardo Saldanha Honorato	PF-PE
Roberto Kawakami Harrop Galvão	ITA
Sérgio Tonetto de Freitas	EMBRAPA Semi árido - Petrolina-PE
Solange Cadore	UNICAMP
Susanne Rath	UNICAMP
Wladiana Oliveira Matos	UFC

<b>PESQUISADORES INTERNACIONAIS</b>	<b>INSTITUIÇÃO</b>
Alberto Ferrer-Riquelme	Universidade do Porto, Portugal
Boris Mizaikoff	Universidade de Ulm, Alemanha
Guillermo Orellana	Universidade Complutense, Espanha
José Cardoso de Menezes	Universidade Técnica de Lisboa, Portugal
José Manuel Amigo	Universidade do País Basco, Espanha
José Manuel Prats-Montalbán	Universidade Politécnica de Valência, Espanha
Maria Cruz Moreno-Bondi	Universidade Complutense Espanha
Maria Conceição Branco Montenegro	Universidade do Porto, Portugal
Pierre Dardene	Walloon Agricultural Research Centre, Bélgica
Vincent Baeten	Walloon Agricultural Research Centre, Bélgica

## APÊNDICE II

**Descrição detalhada das atividades e resultados no tema ambiental: água de reuso.**

**Período: 01/06/2022 a 30/06/2023 - FAPESP**

**TEMA DE PESQUISA: Estação Produtora de Água de Reuso Capivari II (EPAR)**

### **RESUMO:**

O rápido e desordenado crescimento da população juntamente com a intensa industrialização, vem causando a degradação dos corpos hídricos, o que tem gerado um quadro de insegurança em relação ao abastecimento de água. É nesse contexto, que a produção de água de reuso a partir do tratamento de esgoto vem sendo uma prática cada vez mais incentivada. A água de reuso pode ser obtida por meio de estações que utilizam sistemas avançados de tratamento de esgoto, como por exemplo, as que empregam os biorreatores à membrana (MBR) em seus processos. O sistema MBR é eficiente na remoção de matéria carbonácea, nitrogênio e fósforo, além de microrganismos patogênicos, produzindo água com alto grau de qualidade. No entanto, sua eficiência na remoção de micropoluentes específicos, como os contaminantes de preocupação emergentes (CE), ainda precisa ser entendida e estudada. Desse modo, o entendimento da dinâmica e ocorrência dos contaminantes emergentes em estações de tratamento de esgoto podem ajudar a revelar compostos que poderão ser utilizados como marcadores químicos da eficiência do tratamento, garantindo a qualidade da água que poderá ser utilizada seguramente para o reuso, minimizando dessa forma, os efeitos da escassez hídrica.

A Sociedade de Abastecimento de Água e Saneamento (SANASA), empresa de economia mista e atuante no município de Campinas-SP, tem buscado alternativas para aprimorar o tratamento de esgoto visando a produção de um efluente de alta qualidade que possa ser utilizado para fins de reuso potável, auxiliando dessa forma, no gerenciamento da crise hídrica. Nesse contexto, ao Sistemas de Esgotamento da SANASA foi integrada a Estação Produtora de Água de Reuso (EPAR) Capivari II, que opera utilizando biorreatores a membranas de ultrafiltração (MBR), que possibilita a produção de água de reuso a partir de esgotos domésticos. Atualmente, a planta atende uma população de 182.000 habitantes e trabalha com uma vazão média de  $286 \text{ L s}^{-1}$ , possuindo, no entanto, a capacidade de operar com  $360 \text{ L s}^{-1}$  de esgoto. A estação piloto é equipada com módulos envolvendo as operações unitárias de osmose reversa, sistema de aplicação de peróxido de hidrogênio, sistema gerador e de aplicação de ozônio, UV e carvão inerte e biológico. O sistema piloto está diretamente conectado a um tanque de armazenamento do efluente tratado por MBR.

O objetivo do projeto foi centrado no desenvolvimento de pesquisas em cooperação com a SANASA para a produção de água de reuso potável da EPAR-Capivari II que opera com a tecnologia de Biorreatores de Membranas de Ultrafiltração (MBR) e tem em sequência uma estação piloto que permite realizar o polimento por diferentes processos, incluindo a osmose reversa, UV/peróxido e carvão ativado.

<p>(i) Priorização de contaminantes emergentes (fármacos de uso humano, edulcorantes e agrotóxicos) a serem monitorados em efluentes de diferentes ETE da cidade de Campinas, SP, baseados em dados de consumo, incluindo a EPAR Capivari II;</p> <p>(ii) Desenvolvimento e validação de métodos analíticos para a determinação de contaminantes de preocupação emergente priorizados em (i) a nível de ng/L usando a cromatografia líquida bidimensional associada a espectrometria de massas sequencial ou cromatografia líquida associada a espectrometria de massas sequencial com concentração prévia em cartuchos de extração em fase sólida;</p> <p>(iii) Avaliar a presença dos CE selecionados nos afluentes e efluentes das ETE e águas superficiais e selecionar possíveis compostos marcadores que pudessem servir para prever a qualidade do efluente polido na Estação Piloto;</p> <p>(iv) Avaliar os diferentes processos da Estação Piloto (osmose reversa, peróxido de hidrogênio, UV, e carvão ativado) de forma individual ou em combinação na remoção de compostos provenientes do efluente da EPAR e que, por ser recalcitrantes para o processo de tratamento do esgoto, poderiam ser empregados como marcadores de qualidade da água potável de reuso; e</p> <p>(v) Selecionar a melhor combinação de processos de polimento do efluente da EPAR e avaliar a qualidade do efluente tratado pelo processo selecionado mediante análise da água segundo a Portaria GM/MS Nº 888 de 4 de maio de 2021, incluindo ensaios de atividades antimicrobiana, atividade biológica, presença de vírus, bactérias e protozoários e ensaios toxicológicos.</p>	
<b>Susanne Rath</b>	<b>Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Química</b>
<b>Atividade associadas ao projeto:</b> coordenação do projeto, elaboração de relatórios, organização de workshop, orientação de alunos de pós-graduação, priorização de contaminantes de preocupação emergente (fármacos de uso humano e aditivos alimentares) em base a dados de consumo, desenvolvimento e validação de métodos analíticos para a determinação de CE a nível de ng/L usando a cromatografia bidimensional associada a espectrometria de massas sequencial, avaliação da ocorrência e remoção de CE em diferentes estações de tratamento de efluentes de Campinas, avaliação de risco e estudos de sorção de CE em carvão ativado.	
<b>Equipe - Participantes INCTAA:</b>	
<b>Pedro S. Fadini</b>	<b>Universidade Federal de São Carlos (UFSCar)</b>
<b>Atividades associadas ao projeto:</b> desenvolvimento e validação de métodos analíticos para a determinação de CE (fármacos de uso humano) a nível de ng/L usando a cromatografia líquida e gasosa associadas a espectrometria de massas sequencial, avaliação da ocorrência e remoção de CE em diferentes estações de	



tratamento de efluentes. Estudo do emprego de co-substratos metabólicos na remoção de CE em efluentes. Orientação de alunos de pós-graduação.	
<b>Cassiana C. Montagner Raimundo</b>	<b>Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Química</b>
<b>Atividades associadas ao projeto:</b> desenvolvimento e validação de métodos analíticos para a determinação de CE (pesticidas) a nível de ng/L usando a cromatografia líquida associada a espectrometria de massas sequencial, avaliação da ocorrência e remoção de CE em diferentes estações de tratamento de efluentes de Campinas. Avaliação da formação de sub-produtos de desinfecção em água. Orientação de alunos de pós-graduação.	
<b>José Roberto Guimarães</b>	<b>Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Civil, Arquitetura e Urbanismo</b>
<b>Atividade associadas ao projeto:</b> estudos de degradação de compostos com potencial de toxicidade e organismos patogênicos presentes na água de reuso e pertencentes a várias classes de compostos microrganismos de preocupação emergente. São utilizados processos oxidativos como peroxidação (H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> ), ozonização em meio ácido (O <sub>3</sub> /H <sup>+</sup> ), fotólise (UVC); processos oxidativos avançados como a peroxidação assistida por luz ultravioleta (H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> /UVC) e ozonização em meio básico (O <sub>3</sub> /OH <sup>-</sup> ) aplicados à degradação dos compostos de várias classes como os antidepressivos (fluoxetina, o escitalopram e bupropiona), antiparasitário (albendazol, tiabendazol, mebendazol e eprinomectina, imunomodulador (hidroxicloroquina), além disso, são utilizados para inativação de bactérias ( <i>Escherichia coli</i> ) e protozoários ( <i>Giardia</i> spp.). A principal matriz aquosa utilizada nos ensaios é proveniente da EPAR-Sanasa.	
<b>Equipe: Participantes externos ao INCTAA</b>	
<b>Maria Tereza Pepe Razzolini</b>	<b>Universidade de São Paulo</b>
<b>Atividade associadas ao projeto:</b> quantificação dos cistos e oocistos dos protozoários parasitas – <i>Giardia</i> e <i>Cryptosporidium</i> – em amostras antes e após do processo de tratamento para produção de água de reuso para fins potáveis. Os protozoários parasitas <i>Giardia</i> e <i>Cryptosporidium</i> merecem atenção pela resistência a processos de desinfecção, especialmente ao processo de cloração.	
<b>Silvia Figueiredo Costa/Nazareno Scaccia</b>	<b>Universidade de São Paulo – Faculdade de Medicina</b>
<b>Atividade associadas ao projeto:</b> avaliação da qualidade do efluente tratado pelo processo mediante análise microbiológica da água através da contagem de bactérias heterotróficas e indicadores de contaminação fecal (coliformes fecais e/ou <i>Escherichia coli</i> ), análises de bactérias resistentes aos antibióticos, genes de resistência aos antibióticos e presença de vírus.	

<b>José Carlos Mierzwa</b>	<b>CIRRA, Escola Politécnica USP</b>
<b>Atividades associadas ao projeto:</b> consultor técnico sobre o funcionamento e processos instalados na estação piloto uma vez que a instalação desta estação foi conduzida pelo Centro Internacional de Referência em Reuso de Água (CIRRA).	
<b>Ligia Maria Salvo</b>	<b>Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Química e CIRRA POLI/Universidade de São Paulo</b>
<b>Atividades associadas ao projeto:</b> Avaliação da atividade biológica de contaminantes emergentes no sistema de reuso potável direto da Estação de Tratamento de Esgoto Capivari II, usando embriões de zebrafish ( <i>Danio rerio</i> ) e ensaios in vitro com células de linhagem BeWo.	
<b>Renato Rossetto</b>	<b>SANASA</b>
<b>Atividade associadas ao projeto:</b> proponente do projeto por parte da empresa SANASA, consultor dos processos instalados na estação piloto da Estação Produtora de Água de Reuso (EPAR-Capivari II), facilitador das análises físico-químicas do efluente e água, participação na organização de workshop e reuniões.	
<b>Silvia dias</b>	<b>SANASA</b>
<b>Atividade associadas ao projeto:</b> engenheira que atua na EPAR e auxilia na execução dos experimentos a serem realizados na estação piloto.	

#### **Ações realizadas dentro da temática do projeto**

A EPAR Capivari II é uma estação pioneira na utilização de uma das tecnologias mais modernas do mundo para tratamento de esgoto, empregando no processo final um sistema de MBR para remoção de matéria carbonácea, nitrogênio e fósforo, garantindo a desinfecção dentro dos limites legais sem a utilização de produtos químicos, deixando o efluente com alto grau de qualidade. Antes de passar pelas membranas, o esgoto passa por um sistema de gradeamento mecanizado com espaçamento de 15 mm; peneira rotativa com malha circular e 2 mm de abertura; desarenador mecanizado; biorreator com subdivisões: anaeróbia, anóxica, aerada e desoxigenação Este sistema proporciona já um efluente final atendendo a exigentes padrões de qualidade para vários parâmetros, retendo protozoários, bactérias, vírus e sólidos em suspensão. No entanto, o efluente tratado ainda não é adequado para reuso potável direto e necessita de etapa de polimento, que é foco central deste projeto.

O esquema da estação piloto está apresentado na Figura 1 com a indicação dos pontos de coleta das amostras.

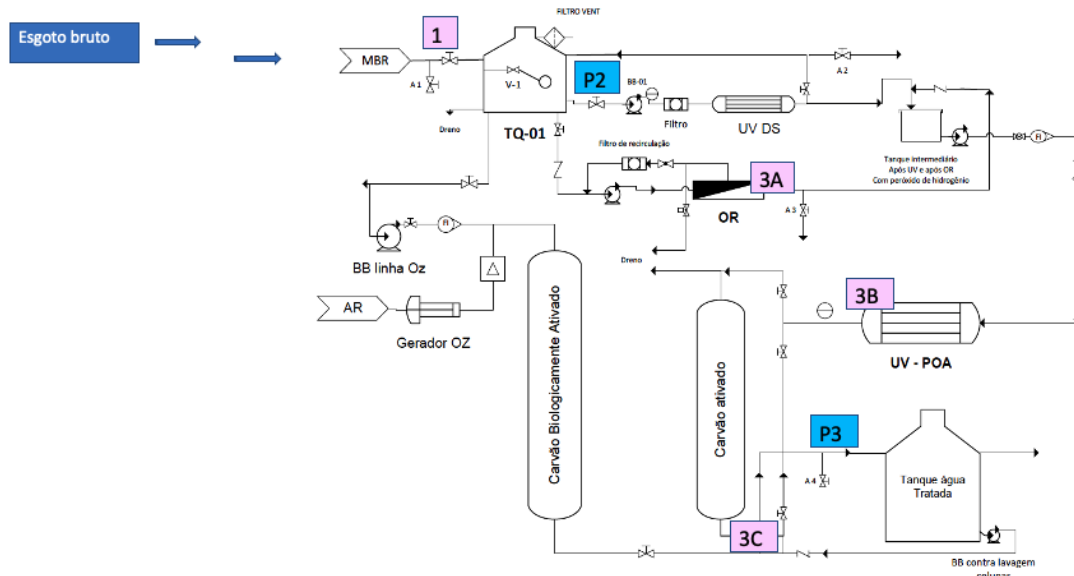


Figura 1 – Esquema da estação piloto (OR: osmose reversa; UV-POA: UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>; OZ: ozônio).

O reator UV (17,5 L) contém 12 lâmpadas UV-C (HNS 55W G13 HO), potência de 1590 mJ/cm<sup>2</sup> e um tempo de contato de 180 s. O peróxido de hidrogênio é bombeado para um tanque equalizador de 80 L situado antes do reator de UV. A dose de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> usada nos estudos é de 6 mg/L. A coluna de carvão ativado granular tem 2,2 m e opera com uma carga hidráulica de 10 m h<sup>-1</sup>. A membrana de OR (LE-40400) é da Dow Filmtec.

No relatório anterior foi apresentado que a combinação OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA seria a melhor combinação para o polimento do efluente pós-MBR desta ETE. O Ponto P2 representa o efluente tratado na EPAR Capivari II e o Ponto P3 efluente pós polimento.

A qualidade do efluente pós MBR (Ponto 2) e após os processos selecionados da estação piloto (OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA) no Ponto 3 foi avaliada mediante determinação dos compostos que compõe a Portaria GM/MS Nº 888 de 4 de maio de 2021. Esta Portaria dispõe sobre os procedimentos de controle e de vigilância da qualidade da água para consumo humano e seu padrão de potabilidade. Foram levados em consideração os valores máximos permitidos (VMP) do padrão:

- Organoléptico de potabilidade;
- Substâncias químicas inorgânicas que representam risco à saúde;
- Substâncias químicas orgânicas que representam risco à saúde;
- Agrotóxicos e metabólitos que apresentam risco à saúde;
- Subprodutos da desinfecção que representam risco à saúde, embora não tenha sido realizada uma cloração no Tanque 02 (efluente final);
- Protozoários e

- Bactérias.

Além disso foram monitorados contaminantes de preocupação emergente.

A estação piloto ficou operante de forma contínua no período de maio de 2022 a novembro de 2022.

No período de maio a outubro de 2022, foram realizadas três campanhas de coletas na estação piloto: 16 de maio de 2022, 16 de agosto de 2022 e 18 de outubro de 2022.

A seguir são apresentados os resultados mais relevantes.

### Parâmetros físico-químicos do efluente pós MBR e efluente polido [OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA]

A caracterização físico-química do efluente pós MBR (coleta no ponto P2) e efluente polido [OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA] (coleta no ponto P3) incluiu as determinação da cor aparente, turbidez, condutividade, DBO, DQO, fósforo total, nitrogênio amoniacal, nitrogênio K total, nitrato, nitrito, sólidos totais, sólidos dissolvidos totais, sólidos suspensos totais e sólidos totais. Os resultados de seis coletas realizadas no período de janeiro a outubro de 2022 estão apresentados na Tabela 1.

Tabela 1 – Resultados dos parâmetros físico-químicos nos pontos de coleta P2 e P3 da estação piloto.

Parâmetro	Unidade	19/01/2022		07/03/2022		14/03/2022		16/mar/22		16/ago/22		18/out/22	
		P2	P3	P2	P3	P2	P3	P2	P3	P2	P3	P2	P3
Cor	mg Pt-Co/L	NA	31.00	46.00	<15	70.00	<15	32.00	<15	65.00	<15	47.00	<15
Turbidez	NTU	NA	0.97	0.20	0.10	0.80	0.23	0.18	0.05	0.14	0.07	0.33	0.14
Condutividade	mS/cm	NA	0.14	0.63	0.02	0.59	0.06	0.59	0.01	0.73	0.02	0.66	0.02
DBO	mg/L	NA	749.00	1.00	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1
DQO	mg/L-O <sub>2</sub>	NA	1360.00	32.00	15.00	24.00	12.00	30.00	12.00	11.00	11.00	15.00	12.00
Fósforo total	mg/L	NA	0.57	3.90	<0.05	7.60	<0.05	1.36	<0.05	0.70	<0.05	3.20	0.10
Nitrogênio amoniacal	mg/L	NA	<0.01	<0.01	<0.01	0.11	0.01	<0.01	<0.01	<0.01	<0.01	<0.01	<0.01
Nitrogênio K total	mg/L	NA	2.43	2.16	0.90	1.76	0.87	0.95	0.75	1.50	1.01	0.90	0.80
Nitrogênio nitrato	mg/L	NA	1.78	4.29	0.27	1.90	0.62	6.81	0.32	6.60	0.88	5.10	0.80
Nitrogênio nitrito	mg/L	NA	0.09	<0.015	<0.015	<0.015	<0.015	<0.015	<0.015	<0.015	<0.015	<0.015	<0.015
SST	mg/L	NA	<2.5	<2.5	5.00	<2.5	<2.5	7.00	<2.5	<2.5	<2.5	<2.5	<2.5
pH	NA	NA	5.60	7.59	6.66	0.00	7.00	NA	NA	NA	NA	0.00	6.80
SDT	mg/L	NA	NA	NA	NA	NA	NA	359.00	<2.5	410.00	34.00	420.00	16.00
ST	mg/L	NA	NA	NA	NA	NA	NA	366.00	<2.5	410.00	34.00	420.00	16.00
COT	mg/L	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	2.38	<1	<1	<1
Sulfato	mg/L	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	52.00	<2	56.00	<2

Os resultados obtidos nas amostragens no período de janeiro a outubro de 2022 indicam a redução da cor, condutividade, fósforo total, SDT, ST e sulfato durante o polimento do efluente pela combinação dos processos OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA (Figura 1).

A condutividade é um parâmetro fácil de ser monitorado e infere a qualidade do efluente polido. Existe uma redução considerável da condutividade (mais do que 10 x) no efluente pós MBR no ponto de coleta P2 em relação ao efluente polido por OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA (P3). No efluente polido, a condutividade registrada nas coletas foi sempre menor do que 0,1 mS/cm.

Em janeiro de 2022, foi registrado um alto valor de condutividade no ponto P3 o que foi decorrente do mal funcionamento das membranas de osmose reversa da Estação Piloto. Esse resultado é importante, uma vez que sinaliza a importância do monitoramento da condutividade no efluente polido uma vez que esse parâmetro permite inferir sobre o bom funcionamento do sistema de osmose reversa. Após a

troca das membranas do sistema de OR, a condutividade atingiu novamente valores menores do que 0,02 mS/cm no ponto P3.

Outro parâmetro que foi importante na detecção de problemas no funcionamento dos processos da Estação Piloto foi a medida de DBO. No dia 19 de janeiro o valor de DBO determinado após OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA foi superior a DBO do esgoto bruto da EPAR Capivari II (Figura 2). Esse resultado foi atribuído ao biofilme formado no carvão ativo da coluna da Estação Piloto. No dia 19 de janeiro também foi observado um valor de DQO no ponto P3 acima de todos os outros valores determinados, o que corrobora com o observado para a DBO e condutividade. Estes resultados indicaram a necessidade da troca do carvão ativado da coluna da Estação Piloto. Após realizado este procedimento foi verificado que o valor de DBO retornou a valores padrões observados (< 1 mg/L) nas coletas de março e maio de 2022.

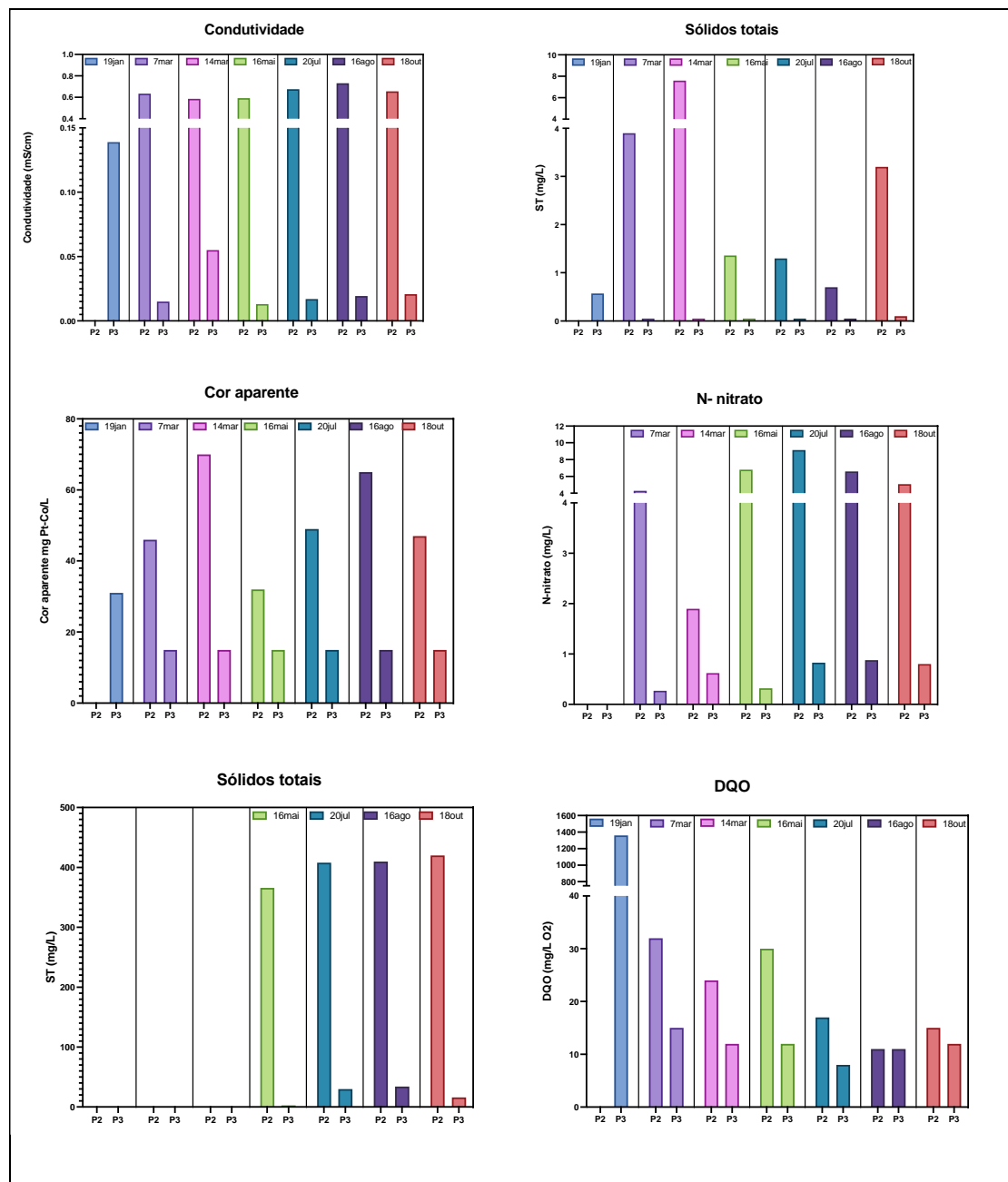


Figura 1 – Parâmetros físico-químicos nos pontos P2 e P3 em diferentes amostragens.

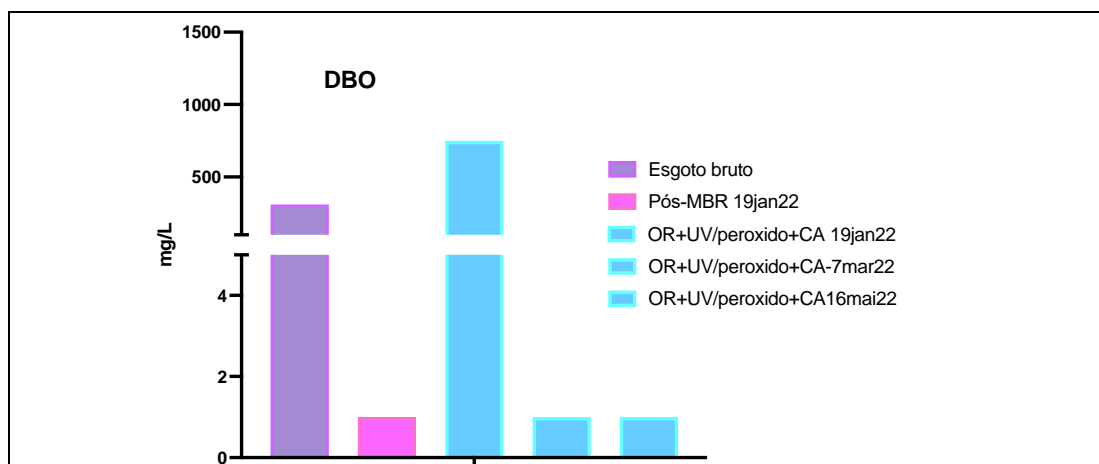


Figura 2 – Valores de DBO no esgoto bruto e pós MBR (P2) no dia 19 de janeiro de 2022 e após processos multibarreiras.

### Monitoramento dos contaminantes de preocupação emergente na Estação Piloto

Três grupos de pesquisa atuaram no monitoramento dos contaminantes emergentes na estação piloto:

Grupo da Profa. Cassiana Montagner (LQA): 2,4 D, fipronil e atrazina, acetaminofeno, cafeína, diclofenaco, ibuprofeno, naproxeno, prednisolona e sulfatiazol.

Grupo do Prof. Pedro Fadini (LBGqA): carbamazepina, diclofenaco, ibuprofeno, propranolol, atenolol, acetaminofeno, naproxeno, 17-alfa-etinilestradiol, triclosan.

Grupo da Profa. Susanne Rath (LBP): sucralose, cafeína, carbamazepina, hidroclorotiazida, sulfametoxazol, albendazol, ricobendazol, propranolol, N-nitrosodimetilamina (NDMA), N-nitrosodietilamina (NDELA), N-nitrosomorfolina (NMOR), N-nitrosodietilamina (NDEA).

As determinações dos contaminantes emergentes foram realizadas por extração em fase sólida *off-line* e quantificação por LC-MS/MS (LQA e LBQgA) ou por extração em fase sólida online a cromatografia líquida de ultra-alta eficiência associada a espectrometria de massas sequencial (SPE-UHPLC-MS/MS) (LBP). Como foram usados métodos distintos, os limites de quantificação para os analitos também foram diferentes.

A vantagem de usar a técnica de SPE-UHPLC-MS/MS (também denominada de LC-UHPLC-MS/MS) é a análise direta da amostra, sem etapa prévia de concentração por SPE (coluna na primeira dimensão cromatográfica). As amostras são apenas filtradas e adicionadas dos padrões internos deuterados.

Os resultados dos contaminantes de preocupação emergentes priorizados nas três coletas no ano de 2022 estão apresentados na Tabela 2. Quando os valores são representados como “<” que significa que esse foi o LOQ do método para aquele



analito. Os resultados em azul na Tabela indicam que houve uma redução significativa do composto durante o tratamento do efluente na Estação Piloto pelos processos OR+UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>+CA.

Tabela 2 - Resultados dos contaminantes de preocupação emergente determinados nos pontos P2 e P3. NA: não analisado.

Análito	Unidade	18/01/2022		14/mar/22		16/mai/22		16/ago/22		18/out/22	
		P2	P3	P2	P3	P2	P3	P2	P3	P2	P3
Sucralose	ng/L	29250	<1000	81000	<1000	13700	<1000	69063	<1000	22982	<1000
Cafeína	ng/L	1502	<100	100	<100	33	51	282	135	<20	<5
Carbamazepina	ng/L	1940	46	2150	<100	2000	98	945	<10	851	<10
Diclofenaco	ng/L	<500	<500	<100	<500	363	32	214	<100	112	<100
Ibuprofeno	ng/L	<5000	<5000	<1000	<1000	288	13	<20	<5	<20	<5
Hidroclorotiazida	ng/L	8880	<1000	4600	<1000	2300	<1000	3836	202	5176	<100
Atenolol	ng/L	NA	NA	NA	NA	444	154	<500	<500	<500	<500
Propranolol	ng/L			Detectado		414	1073	<10	<10	<10	<10
Sulfametoxazol	ng/L	600	<100	<100	<100	200	<100	52	10	26	27
2,4D	ng/L	<1		<1	<2.5	<1	<1	<1	<1	NA	NA
Atrazina	ng/L	248	3.2	74	<1	65	<0.5	<0.5	<0.5	NA	NA
Fipronil	ng/L	41	0.82	13	<0.1	22	<0.1	<0.1	<0.1	NA	NA
Estrona	ng/L			<5000		8	8	<100	<100	<100	<100
NDMA	ng/L	NA	NA	NA	NA	<100	<100	NA	NA	NA	NA
Albendazol	ng/L	1942	<100	150	<100	2700	<100	130	<10	72	21
Ricobendazol	ng/L	<500	<500	<500	<500	<500	NA	<100	<100	104	<100
Acessulfame	ng/L	<1000	<1000	NA	NA	NA	NA	<500	<500	<500	
Sacarina	ng/L	2680	<1000	<1000	<1000	<1000	NA	<100	<100	<100	<100
Acetaminofeno	ng/L	<500	<500	<500	<500	<500	3	<100	3	<100	<100
Naproxeno	ng/L	NA	NA	NA	NA	20	1	<80	<20	<80	<20
17-alfa etinilestradiol	ng/L	NA	NA	NA	NA	10	6	NA	NA	NA	NA
Triclosan	ng/L	NA	NA	NA	NA	9	10	NA	NA	NA	NA
Prednisolona	ng/L					NA	NA	<40	<10	<40	<10

O perfil da variação das concentrações dos CE (amostras coletadas de maio a outubro de 2022) pode ser visualizado na Figura 3 (gráfico superior excluindo a sucralose que apresenta a maior concentração).

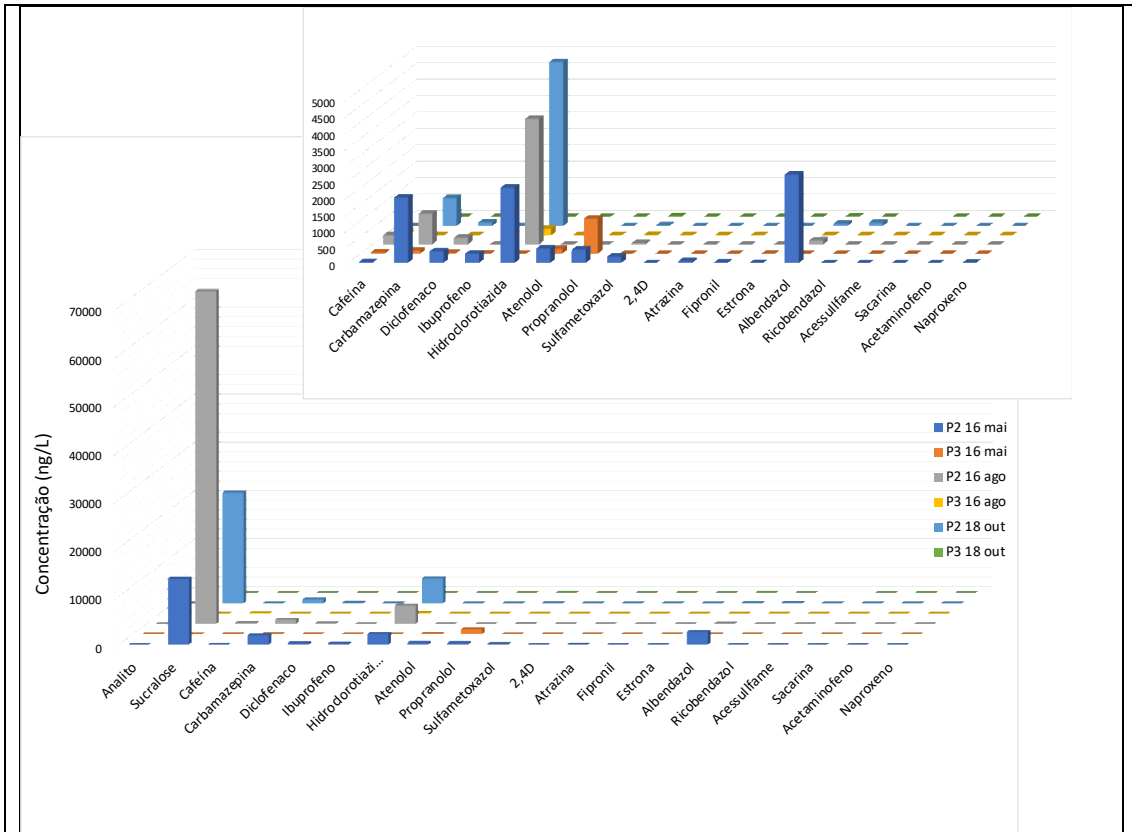


Figura 3 - Concentrações dos CE nas amostras coletadas nos pontos P2 e P3 em diferentes dias.

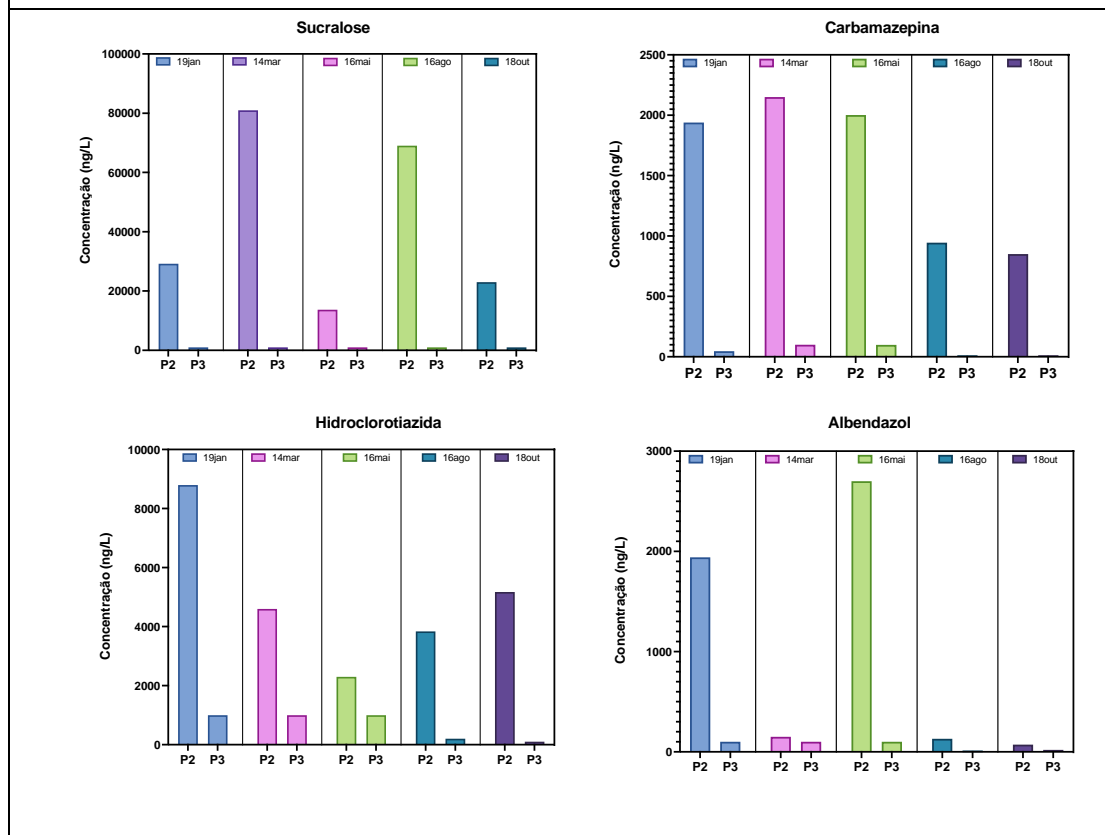


Figura 4 - Concentrações dos compostos nos pontos P2 e P3 em diferentes dias.

A possibilidade de quantificar esses compostos (sucralose, carbamazepina, hidroclorotiazida e albendazol) com os métodos desenvolvidos e validados e a remoção eficiente pelo processo OR+UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA faz destes compostos marcadores em potencial para monitorar a eficiência de remoção e qualidade do efluente tratado na EPAR II Capivari.

Os limites de quantificação destes compostos pela técnica de SPE-UHPLC-MS/MS é de 1000 ng/L para a sucralose, 10 ng/L para a carbamazepina e albendazol e 100 ng/L para a hidroclorotiazida. A vantagem do uso deste método é que as amostras são apenas filtradas e adicionadas dos surrogate (padrões internos deuterados) antes da injeção no sistema.

Concentrações menores (em torno de 100 vezes) podem ser quantificadas se uma etapa prévia de concentração em cartucho de extração em fase sólida for empregada. No entanto, cabe destacar que esse procedimento é moroso e de maior custo e não necessário para o monitoramento nesta Estação Piloto.

### **Monitoramento de bactérias e protozoários**

Os ensaios microbiológicos foram conduzidos na USP-São Paulo sob responsabilidade das Profas. Dras. Maria Tereza Pepe Razzolini, Siliva Figueiredo Costa e Dr. Nazareno Scaccia.

O objetivo foi avaliar a qualidade do efluente tratado pelo processo MBR e após polimento pela combinação dos processos OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA mediante análise microbiológica da água pela contagem de bactérias heterotróficas e indicadores de contaminação fecal (coliformes fecais e/ou *Escherichia coli*), análises de bactérias resistentes aos antibióticos e genes de resistência aos antibióticos. A presença de vírus não foi monitorada, embora tenha sido um dos objetivos propostos.

Após coleta de amostras nos pontos P2 e P3, as amostras (2 L de cada amostra) foram transportadas para o laboratório sob refrigeração ( $\pm 4$  °C) e analisadas em um período menor do que 12 horas.

A metodologia usada baseia-se em uma abordagem dependente de cultivo e métodos independentes de cultivo. O método dependente de cultivo é usado para contagem de bactérias heterotróficas total, coliformes fecais, *Escherichia coli* e bactérias resistentes aos antibióticos e, realiza-se através da semeadura de amostra diretamente em meio de cultura. O método independente de cultivo é usado para determinar a presença de genes de resistência aos antibióticos e de vírus e, realiza-se por meio da filtração de amostra de água através de uma membrana filtrante com tamanho de poro de 0,20  $\mu$ m. Posteriormente, a membrana será utilizada para extração de ácidos nucleicos. Nesta coleta foram avaliadas a presença de organismos por meio de método de cultivo, usando meio de cultivo específico para cada organismo.

Doenças de veiculação hídrica causadas por parasitas mostrou que dos 199 surtos ocorridos no período de 2004 a 2010 publicados na literatura ou relatados pelas vigilâncias epidemiológicas ao redor do mundo eram decorrentes da presença do *Cryptosporidium* (60,3%) seguido por *Giardia lamblia* (35,1%).

A quantificação de cistos *Giardia* e oocistos de *Cryptosporidium* nas amostras da Estação Piloto da EPAR foi realizada de acordo com método 1623/2012 da US

Environmental Protection Agency (USEPA – Método 1623, 2012). O limite de detecção teórico é de 0,1 (oo) cistos/L.

Os resultados da avaliação microbiológica estão compilados na Tabela 3.

Tabela 3 - Resultados da avaliação microbiológica nos pontos de coleta P2 e P3 da estação piloto.

Microorganismo	Unidade	16/mai/22		19/julho/22		16/ago/22	
		P2	P3	P2	P3	P2	P3
Bactérias heterotróficas	UFC/mL	152±11,31	40,5±0,71	161±12,22	110±8,89	108±7,50	18±8,70
<i>Escherichia coli</i>	UFC/mL	0±0	0±0	0±0	0±0	1,00±0	1,0±0
Coliformes totais	UFC/mL	1,5±0,71	0,5±0,71	0±0	0±0	3±2,65	0,00±0,01
Enterobacteriaceae produtoras de β-lactamase de espectro estendido (CHROMagar ESBL)	UFC/mL	60±7,07	17±4,24	30±2,65	25±5,00	52,33±9,02	0,33±0,58
Bactérias produtoras de carbapenemase ( <i>Enterobacteriaceae</i> e <i>Pseudomonas aeruginosa</i> )(CHROMagar mSuperCARBA)	UFC/mL	63±1,4	0±0	8,33±1,53	29±3,00	32,33±9,54	0±0
Enterococci resistentes a vancomicina (CHROMagar VRE)	UFC/mL	0,5±0,71	0±0	14±1,00	2,67±2,31	0±0	0±0
<i>Staphylococcus aureus</i> resistentes à meticilina (CHROMagar MRSA)	UFC/mL	47	A			A	A

### Ensaios de atividade biológica

Os ensaios de atividade biológica foram realizados por Ligia Maria Salvo na Universidade de São Paulo, nas dependências do CIRRA (Centro Internacional de Referência no Reúso da Água), POLI/USP, com a colaboração do Prof. Dr. José Carlos Mierzwa e no Instituto de Ciências Biomédicas no Laboratório de Estudos da Biologia do Trofoblasto sob responsabilidade da Profa. Dra Estela Maris Bevilacqua e contou, ainda, com a colaboração da Dra Elaine Maria Frade Costa do Departamento de Clínica Médica, Divisão de Endocrinologia e Metabologia do HCFM/USP.

Esses ensaios tiveram como objetivo avaliar por meio biomarcadores de contaminação ambiental morfológicos e de atividade estrogênica a eficácia da remoção da atividade biológica dos CE6 com potencial de desregulação endócrina e toxicidade presentes no sistema de águas de reúso potável direto da Estação de Tratamento de Esgoto (ETE) Capivari II (Campinas-SP).

Foram realizados estudos in vivo com embriões de zebrafish e in vitro com células de linhagem BeWo, utilizando o efluente tratado da EPAR (Ponto P2) e após a utilização de tecnologias avançadas de tratamentos no Ponto P3 (OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA). Para os estudos in vivo com embriões de zebrafish, foi realizado o FET TEST (OECD, 2013), e para os estudos in vitro foram realizados ensaios de proliferação celular e curva de crescimento; lactato desidrogenase (LDH); teste do MTT (3-(4,5-dimetiltiazol-2yl)-2,5-di-fenil brometo de tetrazólio) e a marcação das células utilizando anticorpos (primário e secundário) com bromodeoxiuridina (BrdU) e (BrdU) pelo método quantitativo de Elisa. As avaliações do efluente da ETE Capivari II apresentaram resultados preliminares promissores, assim como, a padronização dos métodos no estudo da remoção das atividades biológicas dos CE, tanto in vitro como in vivo. Entretanto, estudos mais aprofundados são necessários, uma vez que, foram realizadas somente quatro coletas durante o período, e algumas intercorrências impediram o desenvolvimento de alguns experimentos. O desenvolvimento e a padronização de métodos e tecnologias mais eficazes a fim de se detectar e avaliar os possíveis efeitos adversos dos CE, presentes nos corpos d'água, incluindo as águas interiores e de consumo humano, são instrumentos de extrema importância na gestão segura dos recursos hídricos, principalmente no que

concerne à preservação dos ecossistemas aquáticos e saúde pública, incluindo as atividades de regulação.

#### *Experimentos in vitro com células de linhagem BeWo*

##### *Cultura de Células BeWo*

Para as avaliações in vitro utilizando a célula de linhagem BeWo, o meio de cultura DEMEM/F12 (Sigma®-Aldrich, St. Louis, MO, EUA), foi preparado, diluindo-se seu conteúdo diretamente nas águas coletadas na EPAR (P2 e P3), as quais foram submetidas aos diferentes tratamentos, T1 (P-MBR) e T2 (OR+UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>+CA). O grupo controle teve o meio de cultura preparado com água purificada em sistema Milli-Q. Após a diluição, os meios de cultura celular passaram pelo sistema de filtração à vácuo PES 0,22m (500 mL) e tiveram seus pH ajustados para 7,4. Na sequência, os meios de cultura foram suplementados com 5% de soro fetal bovino (SBF, CULTILAB, AS, Campinas, Brasil) e antibióticos (100 µg/mL de estreptomicina [Thermo, USA], 5 µL/mL de gentamicina [Cultilab, Brasil] e 2,5 mg/mL de anfotericina B [Cultilab, Brasil]).

##### *Plaqueamento das Células*

Para dar início ao cultivo, microplacas de cultura contendo células BeWo em 100% de confluência passaram por dissociação enzimática com tripsina (tripsina 0,25%, Instituto Adolfo Lutz, SP) e foram posteriormente contadas em contador celular automático (Countess™ Automated cell conter; Invitrogen, Korea) com uso da solução de azul de tripan 0,4% (Trypan Blue solution 0.4%, Sigma®-Aldrich, St. Louis, MO, EUA). As células (BeWo) foram plaqueadas de acordo com os grupos a serem avaliados, em placas de 24 poços na proporção de 1x10<sup>5</sup> de células/mL (200 µL de meio de cultura por poço) e mantidas em estufa de CO<sub>2</sub> com atmosfera modificada de 5% e temperatura de 37 °C. Ao finalizar o experimento foi estabelecida a curva de crescimento das células BeWo cultivadas

O crescimento e proliferação celular foram avaliados a cada 24 horas durante um período total de 48 horas, por meio dos seguintes ensaios: proliferação celular e curva de crescimento; lactato desidrogenase (LDH); teste do MTT (3-(4,5-dimetiltiazol-2yl)-2,5-di-fenil brometo de tetrazólio) e a marcação das células utilizando anticorpos (primário e secundário) com bromodeoxiuridina (BrdU) e (BrdU) pelo método quantitativo de Elisa. As observações diretas das células em cultura foram realizadas em Microscópio Invertido com sistema de análise de imagem ZEISS e o microscópio de fluorescência NIKON- Image Pro Plus foi utilizado para observação e obtenção de imagens das células marcadas com BrdU.

##### *ENSAIO LDH (Lactato Desidrogenase)*

Para avaliar a viabilidade das células de linhagem BeWo sob diferentes tratamentos (controle, T1 e T2), foi realizado o ensaio de LDH (Lactate Dehydrogenase Activity Assay Kit; Cat #MAK066), o qual avalia a presença da enzima desidrogenase liberada pelas células lisadas, permitindo assim a análise da citotoxicidade. O ensaio foi realizado conforme orientações do fabricante. Foi retirado 50 µl do sobrenadante das células cultivadas em diferentes tratamentos, por 24 e 48 horas, essa alíquota do sobrenadante foi transferida para microplacas de 96 poços, onde, posteriormente, foram acrescidos 50 µl de master reaction mix (LDH buffer + LDH substrate mix). O controle negativo consistiu apenas de meio DMEM suplementado, conforme descrito anteriormente. As células foram incubadas nestas condições por

10 minutos a temperatura de 37°C. A quantidade de NADH gerada, que é proporcional à atividade de LDH, foi mensurada em espectrofotômetro (Spectramax Plus 308) na absorvância de 450 nm e 340 nm. Os dados foram expressos como valores médios de absorvância.

#### *ENSAIO DE MTT PARA VIABILIDADE E PROLIFERAÇÃO CELULAR*

O ensaio MTT, é usado para medir a atividade metabólica celular como um indicador de viabilidade e proliferação celular, bem como de citotoxicidade. Esse ensaio colorimétrico é baseado na redução de um sal de tetrazólio amarelo (brometo de 3-[4,5-dimetil-tiazol-2-il]-2,5-difeniltetrazólio ou MTT) para cristais de formazan de coloração roxa por células metabolicamente ativas. Para a realização desse ensaio foram utilizadas culturas de células BeWo em períodos de 24 e 48 horas.

As células BeWo foram cultivadas em placas de 48 poços durante 48 horas. A cada 24 horas foi realizado o ensaio de MTT. Para isso, foi adicionado 200µL de DMEM/F12 (Sigma®-Aldrich, St. Louis, MO, EUA) sem fenol contendo 10% de solução de MTT (Invitrogen™), seguido de incubação durante 1 hora e 30 minutos em estufa úmida a 37°C. Após esse período, todo o meio foi retirado e substituído por DMSO (Dimethyl sulfoxide anhydrous ≥99.9%, Sigma®-Aldrich, St. Louis, MO, EUA) e posteriormente incubado por 10 minutos a temperatura de 37°. Após essa etapa, todo o DMSO foi retirado e transferido para as placas de 96 poços para realização da leitura em espectrofotômetro (Spectramax Plus 308) na absorvância de 570 nm.

#### *AVALIAÇÃO DA PROLIFERAÇÃO POR BROMODEOXIURIDINA (BrdU) UTILIZANDO IMUNOFLUORESCÊNCIA*

Após 48 horas de cultivo em lamínulas, sob as diferentes condições experimentais, as células tiveram o meio de cultura substituído por outro contendo BrdU na concentração final de 40 µL/mL (BrdU kit, Roche Diagnostics, Cat#11.296.736-001), por 3 horas, a temperatura de 37°C. Em seguida, foi realizada a fixação das células com metanol 80% (Sigma®-Aldrich, St. Louis, MO, EUA) por 20 minutos, seguida por sucessivas lavagens com washing buffer. As células foram, então, incubadas com o anticorpo anti-BrdU (mouse monoclonal antibody anti-BrdU) diluído 1:10 em tampão de incubação (Incubation buffer), por 30 minutos, a temperatura de 37 °C e, na sequência, incubados com anticorpo secundário conjugado a fluoresceína (Sheep anti-mouse IgG–fluorescein) diluído 1:10 em PBS, por 30 minutos à 37°C. Por fim, os núcleos das células foram corados por DAPI (coloração nuclear, Vector Laboratories) e os preparados observados em microscopia de fluorescência (Zeiss, Germany). Para o controle negativo, as células foram incubadas com meio de cultivo sem BrdU e seguiram procedimentos semelhantes às células que receberam o BrdU. A atividade proliferativa das células BeWo cultivadas, deveria ser quantificada por meio da medida da área ocupada por núcleos reativos ao BrdU e os núcleos totais, utilizando-se a plataforma ImageJ (<http://rsb.info.nih.gov/ij/index.html>). A área ocupada pela totalidade de núcleos (DAPI, azul) e pelos núcleos BrdU positivos (verde, FITC) deveriam ser medidas após segmentação e deconvolução das imagens transformadas em spots negros, e expressa como valores médios em µm.

#### *AVALIAÇÃO DA PROLIFERAÇÃO POR BROMODEOXIURIDINA (BrdU) UTILIZANDO ELISA*



Com o intuito de avaliar e comparar quantitativamente a atividade proliferativa das células BeWo nas diferentes condições experimentais (Controle, T1 e T2), cultivadas por 48 horas em placas de 96 poços (n=10/poço) tiveram o meio de cultura substituído por outro contendo BrdU na concentração final de 10 µM (Cell Proliferation ELISA, BrdU (colorimetric), cat #11 647 229 001, Roche), por 3 horas, a temperatura de 37°C. O ensaio foi realizado conforme as orientações do fabricante.

#### *AVALIAÇÃO IN VIVO ZEBRAFISH (FISH EMBRYO ACUTE TOXICITY (FET TEST))*

Os estudos in vivo foram realizados de acordo com Fish Embryo Acute Toxicity (FET) Test Organization for Economic Co-operation and Development (OECD), utilizando-se embriões de zebrafish (*Danio rerio*) (OECD, 2013; von Hellfeld et al., 2020), os quais foram obtidos do Laboratório Central da Faculdade de Medicina da USP.

Foram avaliadas as ocorrências das seguintes alterações: a) alterações letais: coagulação do embrião, cauda não isolada, não formação dos somitos; b) alterações não letais: taxa de eclosão, movimento espontâneo, batimento cardíaco, pigmentação do embrião; c) efeitos teratogênicos: presença de escoliose, raquitismo, deformação do vitelo, retardo do crescimento.

Ovos de zebrafish recém fertilizados foram selecionados, onde os embriões coagulados foram descartados, e colocados em microplaca de 24 poços de acordo com cada grupo de estudo a ser avaliado (controle (-) meio embriônico, T1 (MBR), T2 (POA) e etanol controle (+)). O grupo controle foi exposto a 100% de meio embriônico (750 mM KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>; 250 mM Na<sub>2</sub>HPO<sub>4</sub>; 1,5 mM NaCl; 50 mM KCl; 500 mM CaCl<sub>2</sub>+2H<sub>2</sub>O; 350 mM NaHCO<sub>3</sub>); o grupo T1, foi exposto a 50% de meio embriônico acrescido de 50% da água de tratamento T1; o grupo T2 foi exposto a 50% de meio embriônico acrescido de 50% da água de tratamento T2 e o controle positivo foi exposto a 50% de meio embriônico acrescido de 50% de etanol PA. Os embriões foram distribuídos nas microplacas, sendo utilizado aproximadamente 60 embriões por grupo. As microplacas foram mantidas em estufa BOD modificada, com fotoperíodo controlado por um timer (14hs dia/10 horas noite-300 LUX) e temperatura constante de 28°C, por um período de 96 horas. O sistema do experimento foi semi-estático, onde as soluções-teste, eram trocadas a cada 48hs. Os embriões foram avaliados quanto as seguintes características: coagulação de ovos fertilizados, ausência de formação de somitos, ausência de deslocamento do broto da cauda do saco vitelino, ausência de batimentos cardíacos de acordo com o OECD/OCDE (Organização para a Economia Cooperação e Desenvolvimento) 2013.

Para as observações e avaliações dos embriões de zebrafish foi utilizado o Estereomicroscópio Stereo Star Reichert 580 e para a obtenção das imagens o Stereo Discovery V.8 Zeiss.

#### ANÁLISES ESTATÍSTICAS

Os dados estatísticos foram analisados utilizando o programa Graphpad Prism versão 5. Análise de variância (ANOVA) seguida de teste TUKEY. Diferenças com P ≤ 0,05 foram consideradas estatisticamente significativas.

#### RESULTADOS

A curva de crescimento de células BeWo está apresentado na Figura 4 e a comparação dos resultados do crescimento celular entre os diferentes grupos na Tabela 4.

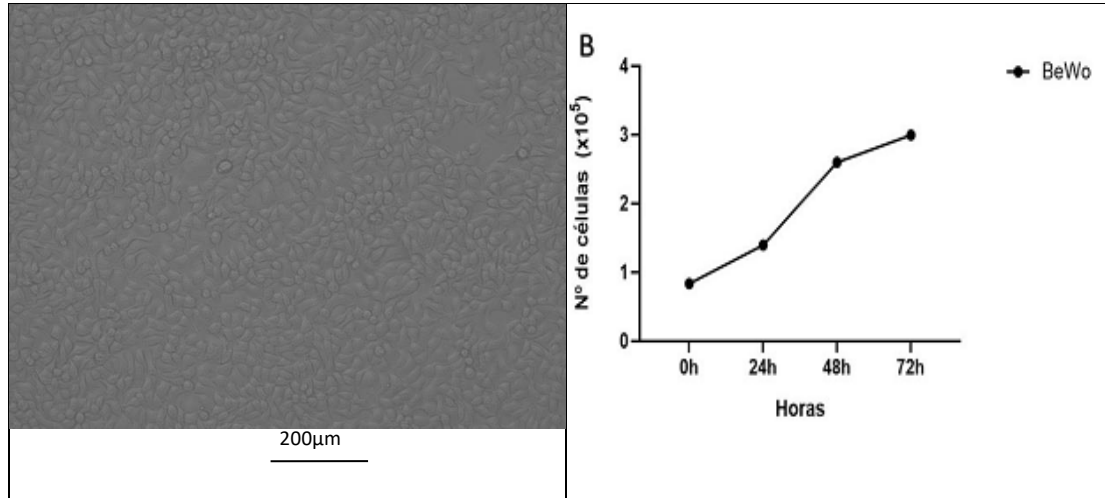


Figura 4 - Cultura de células da linhagem BeWo após 72 horas em cultivo ( $1,0 \times 10^5$ ), observadas em microscópio de luz invertido (A). Curva de crescimento de células BeWo (B).

Tabela 4 - Comparação dos resultados do crescimento celular entre os diferentes grupos.

Tukey's multiple comparisons test	Mean Diff,	95,00% CI of diff,	Significant?	Summary
Control vs. MBR	-0,4833	-1,348 to 0,3810	No	ns
Control vs. POA	-0,7000	-1,564 to 0,1644	No	ns
MBR vs. POA	-0,2167	-1,081 to 0,6477	No	ns

De acordo com os resultados obtidos e avaliados na Tabela 4, não foi encontrada diferença estatisticamente significativa entre os grupos (Controle (ME), T1(MBR) e T2 (P3) (POA)), no que se refere ao crescimento celular das células de linhagem BeWo. São apresentadas as médias, os respectivos erros padrões e a percentagem de diferença do controle. ANOVA seguido de Tukey ( $p > 0,05$ ).

*ENSAIO MTT (brometo de 3-[4,5-dimetil-tiazol-2-il]-2,5-difeniltetrazólio)*

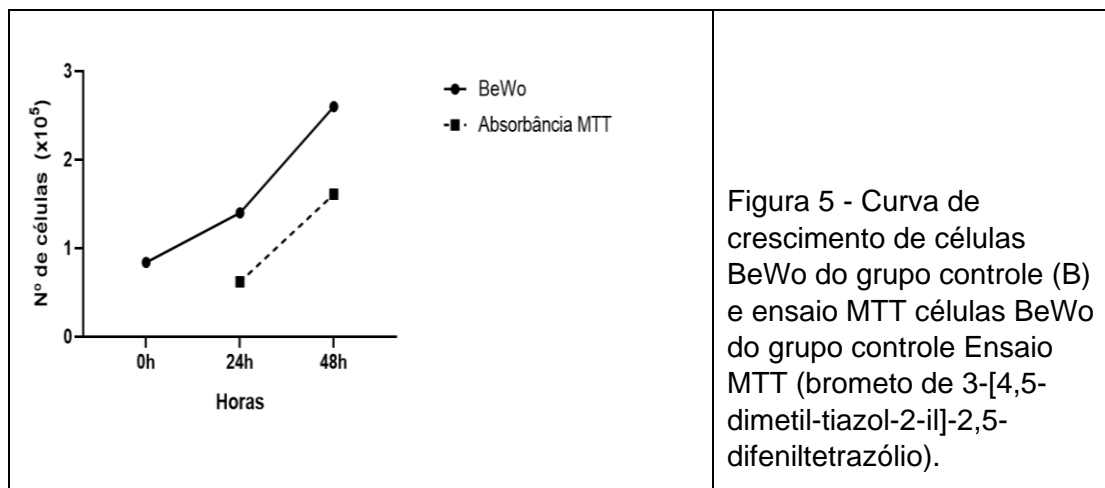
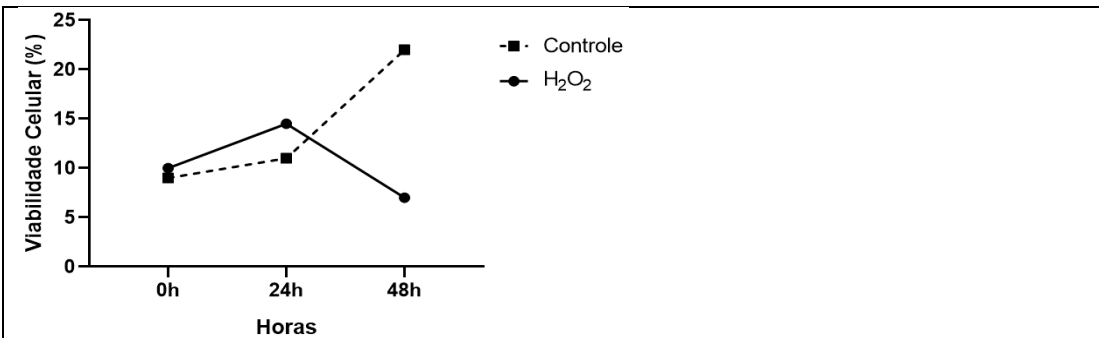


Figura 5 - Curva de crescimento de células BeWo do grupo controle (B) e ensaio MTT células BeWo do grupo controle Ensaio MTT (brometo de 3-[4,5-dimetil-tiazol-2-il]-2,5-difeniltetrazólio).

ENSAIO LDH (Lactato Desidrogenase)



$$\% \text{ Citotoxicidade} = \left[ \frac{\text{Abs do tratamento} - \text{LDH espontâneo}}{\text{LDH máximo} - \text{LDH espontâneo}} \right] \times 100$$

Figura 6 - Cultura de células BeWo do grupo controle expostas ao H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. A) Equação para avaliação de citotoxicidade. B) Comparativo entre curva de crescimento e ensaio de LDH com células BeWo do grupo controle no período de 48 horas.

ENSAIO DE PROLIFERAÇÃO CELULAR (BrdU)

De acordo com a Figura 7, foi observado que a bromodeoxiuridina/BrdU (5-bromo-2'-deoxiuridina) não foi incorporada no DNA das células BeWo em crescimento do grupo controle, permanecendo somente o DAPI corando o núcleo. Esse resultado nos levou a testar outro método quantitativo para avaliar o índice de proliferação celular (Cell Proliferation ELISA, BrdU (colorimetric), cat #11 647 229 001, Roche). Esse método colorimétrico de ELISA demonstrou ser mais eficaz, no que se refere, ao tempo gasto para a realização dos experimentos; a praticidade, pois trata-se de um método de simples execução; e a diminuição de custos, pois o número de amostras a serem avaliadas num mesmo ensaio é muito maior quando comparado ao método de imunofluorescência.

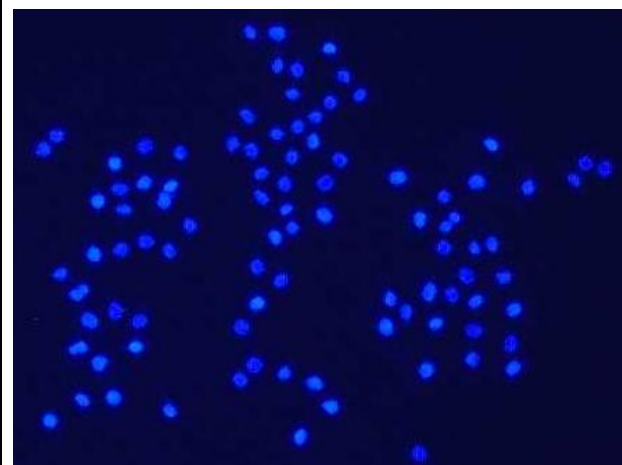


Figura 7- Ensaio de proliferação celular (BrdU) do grupo controle, utilizando imunofluorescência com células BeWo em cultura por 48 horas. Coloração DAPI.

ENSAIOS IN VIVO FET TEST (Embriões de Zebrafish)

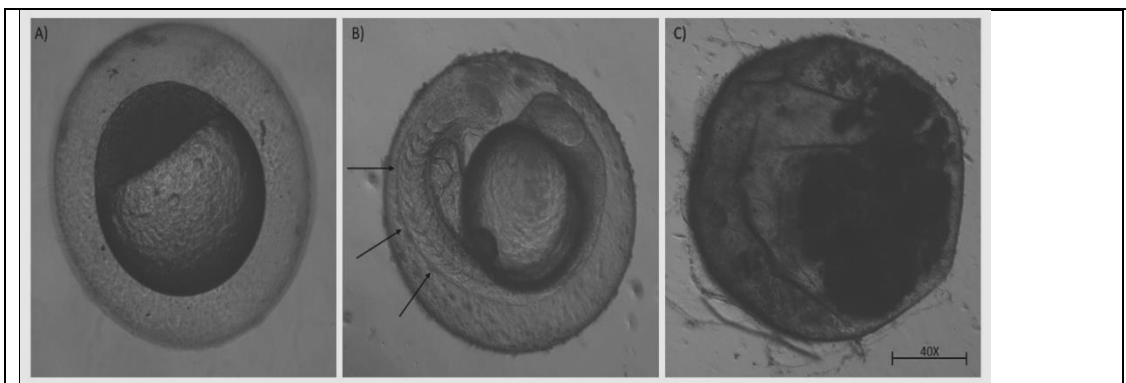


Figura 8 - Embriões de Zebrafish observados durante os experimentos (FET TEST). A) Embrião com desenvolvimento normal após 24 horas de experimento. B) Embrião após 48 h de experimento apresentando formação de somitos. C) Embrião coagulado. Observação realizada em microscópio estereoscópico (ZEISS STEREO Discovery.V8).

A porcentagem de mortalidade dos embriões foi similar entre os diferentes grupos avaliados, mantendo-se baixa, em torno de 3%, e está representada pela Fig. 37C (embrião coagulado). Outras anomalias como as alterações no desenvolvimento de somitos, batimentos cardíacos, movimentos, desenvolvimento do embrião e edema, também foram observados.

Os resultados das principais características avaliadas no FET TEST estão representados nas Tabelas 5 e 6.

Tabela 5 - Comparação dos dados referentes ao número de embriões coagulados entre os diferentes grupos (ME= Controle (-); MBR=T1; POA=T2; Etanol=Controle (+)).

Tukey's Multiple Comparison Test	Mean	Diff.	q	P value	95% CI of diff
ME vs MBR	-0,7500	1,897	P > 0.05	-2.527	to 1.027
ME vs MBR1	-0,7500	1,897	P > 0.05	-2.527	to 1.027
ME vs POA	-0,5000	1,265	P > 0.05	-2.277	to 1.277
ME vs POA1	-0,2500	0,6325	P > 0.05	-2.027	to 1.527
* ME vs ETANOL	-2,500	6,325	P < 0.01	-4.277	to -0.7232
MBR vs MBR1	0,0000	0,0000	P > 0.05	-1.777	to 1.777
MBR vs POA	0,2500	0,6325	P > 0.05	-1.527	to 2.027
MBR vs POA1	0,5000	1,265	P > 0.05	-1.277	to 2.277
MBR vs ETANOL	-1,750	4,427	P > 0.05	-3.527	to 0.02680
MBR1 vs POA	0,2500	0,6325	P > 0.05	-1.527	to 2.027
MBR1 vs POA1	0,5000	1,265	P > 0.05	-1.277	to 2.277
MBR1 vs ETANOL	-1,750	4,427	P > 0.05	-3.527	to 0.02680
POA vs POA1	0,2500	0,6325	P > 0.05	-1.527	to 2.027
* POA vs ETANOL	-2,000	5,060	P < 0.05	-3.777	to -0.2232
* POA1 vs ETANOL	-2,250	5,692	P < 0.01	-4.027	to -0.4732

De acordo com os resultados obtidos e avaliados na Tabela 5, não foram encontradas diferenças estatisticamente significativas entre os diferentes grupos (ME= Controle (-); MBR=T1; POA=T2), no que se refere aos números de embriões coagulados, com exceção do controle positivo etanol. São apresentadas as médias, os respectivos erros padrões e a porcentagem de diferença do controle. ANOVA seguido de Tukey (p > 0,05).

Tabela 6 - Comparação dos dados referentes a formação de somitos entre os diferentes grupos (ME= Controle (-); MBR=T1; POA=T2; Etanol=Controle (+)).

Tukey's Multiple Comparison Test	Mean	Diff.	q	P value	95% CI of diff
ME vs MBR	1,250	2,660	P > 0.05	-0.8022	to 3.302
ME vs MBR1	0,7500	1,596	P > 0.05	-1.302	to 2.802
* ME vs POA	2,250	4,788	P < 0.05	0.1978	to 4.302
ME vs POA1	1,500	3,192	P > 0.05	-0.5522	to 3.552
MBR vs MBR1	-0,5000	1,064	P > 0.05	-2.552	to 1.552
MBR vs POA	1,000	2,128	P > 0.05	-1.052	to 3.052
MBR vs POA1	0,2500	0,5320	P > 0.05	-1.802	to 2.302
MBR1 vs POA	1,500	3,192	P > 0.05	-0.5522	to 3.552
MBR1 vs POA1	0,7500	1,596	P > 0.05	-1.302	to 2.802
POA vs POA1	-0,7500	1,596	P > 0.05	-2.802	to 1.302

De acordo com os resultados obtidos e avaliados na Tabela 6, foi encontrada uma diferença estatisticamente significativa entre os grupos Controle (ME) e o grupo POA (Processos Oxidativos Avançados) no que se refere à formação de somitos. São apresentadas as médias, os respectivos erros padrões e a porcentagem de diferença do controle. ANOVA seguido de Tukey ( $p > 0,05$ ).

Esse resultado pode ter ocorrido em função de uma carga residual de peróxido, ao final do processo oxidativo. De acordo com outros estudos, esse residual pode ser neutralizado utilizando-se a catalase. Esse resultado precisa ser averiguado com uma atenção especial nos próximos estudos, já que, as alterações na formação de somitos, está relacionada a um dos efeitos considerados letais pelo FET TEST.

### CONCLUSÃO

As avaliações das águas da ETE Capivari II apresentaram resultados preliminares promissores, assim como, a padronização dos métodos no estudo da remoção das atividades biológicas dos CE, tanto in vitro como in vivo. Entretanto, estudos mais aprofundados são necessários, uma vez que, foram realizadas somente quatro coletas durante o período, e algumas intercorrências impediram o desenvolvimento de alguns experimentos. O desenvolvimento e a padronização de métodos e tecnologias mais eficazes a fim de se detectar e avaliar os possíveis efeitos adversos dos CE presentes nos corpos d'água, incluindo as águas interiores e de consumo humano, são instrumentos de extrema importância na gestão segura dos recursos hídricos, principalmente no que concerne à preservação dos ecossistemas aquáticos e saúde pública, incluindo às atividades de regulação.

### Avaliação da qualidade do efluente tratado segundo a portaria de potabilidade

Os resultados apontam o que segue.

#### *Organoléptico de potabilidade*

Nos elementos que compõe o padrão organoléptico de potabilidade foi verificado que o cloreto, cor aparente e dureza das amostras coletadas no ponto P2 não atenderam os VMP da Portaria GM/MS Nº 888. No entanto, após o processo OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA essas concentrações diminuíram, o que significa a remoção destes elementos no polimento do efluente. Apenas uma amostra coletada no ponto P3



apresentou uma concentração de cloreto (15 mg/L) acima do VPM de 11 mg/L. Reduções significativas nas concentrações de cloreto, cor aparente, dureza, sódio e sulfato foram observadas após o processo OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA, o que indica que esses elementos podem ser importantes no monitoramento do processo de polimento do efluentes.

*Substâncias químicas inorgânicas que representam risco à saúde*

O efluente pós-MBR (amostras coletadas no Ponto 2) já atendem todos os VMP da Portaria GM/MS Nº 888 o que é atribuído a eficiência do MBR no final do tratamento do esgoto da EPAR. No Ponto 3, após o processo OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA todos os resultados também atendem os VMP. Comparando os resultados das coletas no ponto P2 e P3 verifica-se uma redução na concentração de íons cálcio, fluoreto e nitrato.

*Substâncias químicas orgânicas que representam risco à saúde*

O mesmo comportamento observado para as substâncias inorgânicas também foi observado para as substâncias químicas orgânicas, sendo que todas as amostras coletadas, tanto no ponto P2 como P3, apresentaram valores abaixo dos VMP da Portaria GM/MS Nº 888.

*Agrotóxicos e metabólitos que apresentam risco à saúde*

As concentrações determinadas dos agrotóxicos elencados na Portaria GM/MS Nº 888 nos pontos P2 e P3 foram todas menores do que os VMP, indicando um baixo aporte destes contaminantes pelo esgoto doméstico ou uma provável remoção eficiente pelo MBR, que requer estudos adicionais.

*Subprodutos da desinfecção que representam risco à saúde*

Uma vez que não se fez a cloração no efluente pós OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA seria esperado que não houvesse a formação de subprodutos de desinfecção. No entanto, nesta lista de substância consta a N-nitrosodimetilamina (NDMA) que poderia estar presente no efluente decorrente da nitrosação de aminas. A NDMA, assim como outras N-nitrosaminas tem reconhecido potencial carcinogênico e, portanto, a sua determinação é importante. Cabe ressaltar que em todas as amostras analisadas as concentrações de NDMA estavam abaixo de 0,1 µg/L. Por outro lado, cabe mencionar que a NDMA pode ser formada na cloração do efluente o que é recomendável que seja avaliado em estudos futuros principalmente na pós-cloração.

*Protozoários*

Os protozoários monitorados foram o *Cryptosporidium sp* e a *Giardia*. Em três dias de amostragens foram observados um aumento de oocistos/L de *Giardia* no Ponto P3 em relação ao Ponto P2. Esse comportamento sugere que estudos adicionais sejam novamente realizados para o melhor entendimento deste resultados.

*Bactérias*

Apesar do MBR contribuir para a melhora da qualidade do efluente em diversos aspectos já discutidos anteriormente, ainda se observa a presença de bactérias no efluente pós-MBR evidenciando a necessidade de um tratamento adicional para gerar uma água de reúso potável.



No polimento do efluente pós-MBR pelo processo OR+UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>+CA foi observada uma redução da contagem de bactérias heterotróficas, a remoção de coliformes totais, E. coli e pseudomonas aeruginosa, o que indica a eficiência do processo empregado na Estação Piloto e comprova a necessidade do uso do mesmo.

### **Considerações Finais**

O projeto INCTAA-SANASA para avaliar a potencialidade de gerar água de reúso potável a partir do efluente de esgoto doméstico reuniu um grupo de pesquisadores da SANASA e de diversas instituições de ensino superior.

A expertise deste grupo permitiu uma abordagem ampla em um assunto complexo e muito desafiador. Foi desenvolvido um número significativo de métodos analíticos para a determinação de contaminantes de preocupação emergente usando tecnologias no estado da arte que foram essenciais para sua aplicação na definição de possíveis marcadores da qualidade do efluente tratado e monitoramento nos estudos de ocorrência e remoção de compostos de contaminação emergentes em ETE que empregam diferentes processos de tratamento.

Todo esse conhecimento foi essencial para os estudos conduzidos na EPAR Capivari visando avaliar a possibilidade de gerar água de reúso potável. Inúmeros estudos foram realizados para entender a qualidade do efluente pós-MBR que é um diferencial importante quando comparado as outras estações avaliadas neste trabalho. Ficou evidente que o efluente tratado por bioreatores de membranas é de alta qualidade e é fundamental para viabilizar a produção de água de reúso potável. Todos os resultados obtidos ao longo dos estudos realizados corroboram essa afirmação.

Em 2016 foi realizado um estudo na Estação Piloto da EPAR por pesquisadores do CIRRA no qual se concluiu que o melhor arranjo de tratamento, considerando-se os parâmetros de qualidade avaliados, era aquele que combinava os processos de osmose reversa e oxidação fotoquímica e desinfecção. Mesmo com esses resultados, enfatizou-se a necessidade da realização de um estudo de maior duração, considerando-se o arranjo definido, além de avaliar a eficiência do mesmo em relação à remoção de contaminantes específicos, principalmente fármacos e outros produtos químicos orgânicos, com potencial de estarem presentes nos esgotos.

Em base a essas informações foi realizado um trabalho de priorização de contaminantes emergentes (fármacos, edulcorantes e agrotóxicos) para selecionar possíveis marcadores que pudessem atestar a qualidade do efluente tratado pelo processos da Estação Piloto. Como moléculas marcadoras representantes de insumo farmacêuticos ativos indica-se a sucralose, hidroclorotiazida, carbamazepina e albendazol e do grupo de agrotóxicos a atrazina. Com essas moléculas foi possível observar a necessidade de acrescentar o uso do carvão ativo no arranjo OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> para uma remoção eficiente de contaminantes orgânicos. Sendo assim, os estudos conduzidos na Estação Piloto da EPAR foram conduzidos majoritariamente com o arranjo OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA. A caracterização e estudos de sorção no carvão instalado na Estação Piloto comprovaram a sua alta eficiência na remoção de compostos orgânicos, assim como a possibilidade da regeneração do carvão da coluna.

Para verificar a potabilidade da água de reuso foram monitorados os compostos que compõe a Portaria GM/MS Nº 888 de 4 de maio de 2021 e os valores máximos permitidos nesta. Foram verificados que os padrões organoléptico de potabilidade, substâncias químicas inorgânicas e orgânicas, agrotóxicos e metabólitos e subprodutos da desinfecção que apresentam riscos à saúde foram todos atendidos no efluente tratado pelos processos OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA. Em adição, o processo foi capaz de remover bactérias heterotróficas, coliformes totais, E. coli e pseudomonas aeruginosa que ainda estavam presentes no efluente pós-MBR. Para os protozoários monitorados (*Cryptosporidium sp* e a *Giardia*) os resultados não foram conclusivos e carecem de estudos adicionais. No que concerne a remoção de atividade biológica, estudos in vitro e in vivo, os resultados preliminares foram promissores, no entanto, também requerem estudos adicionais.




De maneira geral, os resultados obtidos neste projeto indicam a concreta possibilidade da geração de água potável do esgoto tratado na EPAR e usando o processo combinado OR + UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CA. Como marcadores para avaliar o bom funcionamento dos processos da Estação Piloto indica-se o monitoramento da condutividade, cor aparente, dureza, DQO, concentração de cloreto, cálcio, sulfato, sódio, sucralose, hidroclorotiazida, carbamazepina, albendazol e atrazina. Para confirmar essa proposta, sugere-se que estes marcadores sejam monitorados por um maior período abrangendo as diferentes estações do ano. Cabe ressaltar, que os marcadores da classe dos contaminantes emergentes podem variar, pois estes dependem do perfil de consumo da população.

Como etapas futuras seria interessante considerar a continuidade dos estudos envolvendo a avaliação de bactérias, protozoários, vírus, ensaios de toxicidade, e produtos de desinfecção, após processo de cloração do efluente tratado.

#### **Atividades que contemplaram a colaboração entre pesquisadores ou grupos do INCTAA (artigos, trabalhos congressos, entre outros):**

O grupo de pesquisadores deste projeto integrante do INCTAA e pesquisadores associados tem trabalhado em diferentes frentes de pesquisa que se complementam na temática da produção de água de reuso potável na EPAR-Capivari II: identificação de marcadores em efluentes, desenvolvimento de métodos, avaliação da presença de CE, remoção de compostos recalcitrantes por processos oxidativos avançados, sorção de CE em carvão, ensaios de toxicidade, atividade antimicrobiana e outros. Todos esses estudos são essenciais para avaliar os processos instalados na estação piloto da EPAR (osmose reversa, peróxido de hidrogênio, UV, ozônio e carvão ativado) e para avaliar a qualidade do efluente tratado por estes processos visando a produção de água de reuso potável.

Em 30 de junho de 2023 foi realizado o workshop de encerramento do projeto (programação a seguir).

## INCTAA-SANASA

### Workshop de encerramento

Local: Instituto de Química, UNICAMP

IQ 14 - Bloco E (primeiro andar)

30 de Junho 2023

### ESTAÇÃO PILOTO DA ESTAÇÃO PRODUTORA DE ÁGUA DE REUSO (EPAR-CAPIVARI II)

---

*Programação*

Horário	Atividade	Responsável
9:00 - 9:10	Abertura do workshop	Susanne Rath
9:15 - 9:35	Parâmetros microbiológicos no reúso de água potável	Maria Tereza P. Razzolini
9:40 - 10:00	Alternativas para o uso do carvão ativado na planta piloto da EPAR Capivari II	Vinicius Diniz
10:00 - 10:30	Coffee Break	
10:30 - 10:50	Remoção de pesticidas pela EPAR-Capivari	Cassiana Montagner
10:30 - 11:00	Avaliação da atividade biológica dos contaminantes emergentes , no sistema de reúso potável direto da Estação de Tratamento de Esgoto Capivari II	Ligia Morales
11:00 - 11:30	Produção de água de reúso potável: estudos na estação piloto da EPAR Capivari II	Susanne Rath
11:30 - 12:00	Homenagem - Renato Rossetto	Pedro Fadini

**Atividades e resultados que contemplaram colaborações entre INCTs (artigos, trabalhos congressos, entre outros):**

Nada a declarar.

## APÊNDICE III

**Período: 01/06/2022 a 30/06/2023**

**TEMA DE PESQUISA:**

**1) Compostos emergentes e microplásticos em amostras ambientais**

**2) Microplásticos em ecossistemas de água doce: avaliação da presença, processos de sorção e desenvolvimento de métodos de remediação**

**RESUMO PROJETO 1:**

A proposta consiste na realização de um trabalho de avaliação de contaminantes emergentes (CE) e microplásticos (MP) em águas superficiais e em material particulado na atmosfera. No que diz respeito às águas superficiais, é avaliada a presença destes contaminantes nas localidades onde cada pesquisador se encontra, buscando-se estabelecer o impacto causado ao ecossistema, devido às pressões antrópicas sofridas nestes ambientes. No caso de MP na atmosfera, são estudadas metodologias de tratamento da amostra para separação de MP, degradação de matéria orgânica e posterior análise, além de coletas em distintos ambientes para verificar a presença e composição destes materiais, e avaliar sua toxicidade.

**RESUMO PROJETO 2:**

A proposta possui como objetivo investigar a contaminação originária de plásticos de corpos aquáticos com diferentes cenários de contaminação: Rios Guaíba, Monjolinho, Jundiaí, Tietê, Paraíba do Sul, Barigui e Iguazu, Lago Paranoá e Lagoa da Pampulha. Será realizada a otimização do processo de digestão para a extração dos MP em águas, a fim de verificar se esses sofrem modificações morfológicas e estruturais durante esta etapa do protocolo. Serão realizadas campanhas de amostragem nas 4 estações do ano, abrangendo coletas sazonais, em períodos de estiagem e de maior precipitação. Com os resultados gerados, pretende-se fazer um site com banco de dados aberto com interface para aumento do acervo de informações a partir de usuários externos. Processos de sorção de contaminantes (como HPA, fármacos, hormônios) em MP e o desenvolvimento de processos de remediação também serão realizados.

**Coordenador do projeto 1:**

**Maria Cristina Canela**

**Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro (UENF)**

**Atividade associadas ao projeto:**

-Coleta de água e sedimento para análise de microplásticos e contaminantes emergentes no Rio Paraíba do Sul. Testes com diferentes métodos de coleta e tratamento da amostra. Participação de um aluno de iniciação científica e um aluno de doutorado;

- Visita ao Grupo de Química Ambiental da UNICAMP para realização de análises de contaminantes emergentes em águas do Rio Paraíba do Sul - aluno de iniciação científica;
- Participação no trabalho sobre avaliação da interferência dos processos oxidação da matéria orgânica sobre os polímeros prístino e degradado. Trabalho com a UNICAMP, UFRGS e UFSCAR-Sor. Participação de um aluno de iniciação científica e um aluno de doutorado;
- Coleta e análise de microplásticos em material particulado na atmosfera - colaboração com o grupo da UFSCAR. Envolvendo aluna de mestrado;
- Análise de microplásticos no sistema gastrointestinal e brônquias em elasmobrânquios. Envolvendo aluno de doutorado e aluno de iniciação científica;
- Orientação de um aluno de doutorado, um de mestrado e duas iniciações científicas em andamento relacionadas ao projeto.

**Coordenador do projeto 2:****Andreia Neves Fernandes****Universidade Federal do Rio Grande do Sul  
(UFRGS)****Atividade associadas ao projeto:**

- Estudo de obtenção de fase ligante a base de óxido de grafeno reduzido para aplicação em dispositivos baseados na técnica de difusão em filmes finos por gradiente de concentração (DGT). Aplicação das fases em DGT na remoção de contaminantes emergentes em água;
- Coleta de amostras de água superficial no Rio Guaíba para determinação de microplásticos e contaminantes emergentes em diferentes ambientes, envolvendo a participação de uma aluna de doutorado;
- Trabalho de cooperação entre a UFRGS, UFSCAR-Sor, UENF e UNICAMP para avaliação do processo de digestão/degradação dos microplásticos empregando diferentes reagentes. Participação de uma aluna de doutorado;
- Coleta de amostras de água bruta e tratada de diferentes ETA de Porto Alegre para determinação de microplásticos, envolvendo a participação de uma aluno de iniciação científica e uma aluna de iniciação tecnológica;
- Coleta de amostras de água superficial na Região Estuarina do Rio Tramandaí para determinação de microplásticos e contaminantes emergentes em diferentes ambientes, envolvendo a participação de uma aluna de mestrado;
- Determinação de microplásticos em amostras de fertilizante industrial, com a participação de uma pós-doc e um aluno de iniciação científica;
- Ensaio de degradação de sacolas oxo-degradáveis de polietileno em condições outdoor e indoor (caixa de degradação UVA). Participação de uma aluna de doutorado, a qual é co-orientada pelo Prof. Walter Ruggeri Waldman da UFSCAR-Sor;
- Ensaio de degradação de sacolas oxo-degradáveis de polietileno microcosmos simulando condições ambientais em caixa de degradação UVA. Participação de uma

aluna de doutorado, a qual é co-orientada pelo Prof. Walter Ruggeri Waldman da UFSCAR-Sor;

-Estudos de degradação de microplásticos de poliamida em caixa de degradação UVC e aplicação dos microplásticos prístinos e degradados na interação de contaminantes emergentes. Participação de um aluno de graduação e uma aluna de doutorado;

-Estudo de liberação de microfibras de roupas de 50% poliéster e 50% algodão por meio de lavagem manual. Avaliação do uso e participação de uma aluna de doutorado, a qual é co-orientada pelo Prof. Walter Ruggeri Waldman da UFSCAR-Sor;

-Orientação de quatro doutorandas, uma mestranda e quatro estudantes de graduação em andamento relacionadas ao projeto;

-Supervisão de uma pesquisadora de pós-doutorado sobre microplásticos em fertilizantes.

Pesquisador

**Fernando Fabriz Sodré**

**Universidade de Brasília (UNB)**

**Atividade associadas ao projeto:**

-Coleta de água para análise de microplásticos no Lago Paranoá. Testes com diferentes métodos de coleta e medição de vazão. Participação de uma aluna de mestrado e um aluno de graduação;

-Visita de aluna de mestrado ao LAPACE da UFRGS, coordenado pela Prof<sup>a</sup>. Andreia Neves Fernandes, para realização de treinamento nos métodos voltados à análise de amostras de água para microplásticos;

-Ensaio de degradação de microplásticos prístinos (PP, PS, PVC e PE) com luz UV e ensaios de adsorção de micropoluentes emergentes. Participação de um aluno de doutorado;

-Coleta e caracterização de microplásticos na atmosfera. Participação de uma aluna de doutorado;

-Orientação de dois doutorandos, uma mestranda e um estudante de graduação em andamento relacionadas ao projeto.

Pesquisador

**Gilberto Abate**

**Universidade Federal do Paraná (UFPR)**

**Atividade associadas ao projeto:**

-Uma amostra de argilomineral (vermiculita) foi silanizada com diferentes compostos, visando o emprego para a extração e concentração de HPAs de meio aquoso em batelada. Os materiais obtidos foram submetidos à caracterização por FTIR, MEV, TGA, DRX e análise elementar;

-O argilomineral montmorilonita foi tratado de modo a obter uma fase mineral magnética, a qual foi utilizada como fase sorvente para a extração e concentração de cinco herbicidas triazínicos de meio aquoso em batelada. Os materiais obtidos foram submetidos à caracterização por FTIR, MEV e DRX;



- Vem sendo conduzida a modificação de carvão ativado, sintetizado a partir de casca de banana e tratado magneticamente, visando a aplicação para a extração e concentração de contaminantes emergentes de relevância ambiental presentes no meio aquoso;
- Foram sintetizadas espumas de poliuretano visando a extração e concentração de herbicidas triazínicos de meio aquoso, bem como dois produtos de degradação da atrazina. O processo foi conduzido por extração em fase sólida em coluna. As espumas obtidas foram caracterizadas pelas técnicas de FTIR, DSC e microscopia óptica;
- Foi conduzida a avaliação da liberação de microfibras (MFs) decorrente da lavagem de roupas de três diferentes máquinas de lavar bem como a comparação das características de MFs de poliéster e de algodão com as MFs liberadas. As MFs foram caracterizadas por FTIR, MEV e teor de cinzas;
- Estão sendo produzidas partículas de microplásticos originárias de polietileno (alta e baixa densidade), polipropileno, PVC e poliamida, as quais serão posteriormente caracterizadas e submetidas a estudos de sorção com diferentes contaminantes emergentes. Pretende-se avaliar o efeito da fotodegradação nas partículas, bem como a influência no processo de sorção;
- Foram defendidas três dissertações de mestrado e uma tese de doutorado, entre novembro de 2022 e abril de 2023.

Pesquisador

**Marco Tadeu Grassi**

**Universidade Federal do Paraná (UFPR)**

**Atividade associadas ao projeto:**

No que se refere aos contaminantes emergentes, está em andamento projeto que visa estudar o uso de diferentes fases ligantes, em dispositivos baseados na técnica de difusão em filmes finos por gradiente de concentração (DGT), para aplicação na determinação de contaminantes emergentes em amostras aquosas, tanto águas superficiais quanto aquelas destinadas ao abastecimento público. Neste período foi avaliada a utilização de carvão ativado comercial como fase ligante. O material foi caracterizado empregando-se microscopia eletrônica de varredura (MEV) e foram testadas diferentes espessuras da fase ligante, para obtenção de uma membrana homogênea, assim como de séries de membranas igualmente homogêneas.

Com relação ao Projeto 2, foram coletadas amostras de água no Rio Barigui, localizado na Região Metropolitana de Curitiba, em pontos de amostragem à montante e à jusante de um ponto de lançamento de efluentes de uma estação de tratamento de esgoto. As amostras foram processadas (filtradas e pré-tratadas), de acordo com os protocolos definidos pelo grupo do INCTAA que trabalha com microplásticos, tendo sido parcialmente analisadas, sob microscópio, para caracterização.

Em paralelo uma antiga capela de exaustão existente no laboratório do Grupo de Química Ambiental da UFPR foi reformada, tendo sido totalmente adaptada para a realização de trabalhos envolvendo a determinação de microplásticos. Toda a reforma foi realizada pela doutoranda Jessica Stival, de maneira a minimizar os efeitos da contaminação do ambiente laboratorial.

Pesquisador	
<b>Cassiana Montagner</b>	<b>Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)</b>
<b>Atividades associadas ao projeto:</b> Desenvolvimento de protocolo analítico e determinação de microplásticos e contaminantes emergentes em corpos d'água; Avaliação da sorção de contaminantes emergentes em microplásticos.	
Pesquisador	
<b>Pedro Fadini</b>	<b>Universidade Federal de São Carlos (UFSCAR)</b>
<b>Atividade associadas ao projeto:</b> Foi desenvolvido um sistema de amostragem com balde, pesagem e fluxo por um dispositivo onde o material particulado é retido em uma malha filtrante. Têm sido realizadas amostragens de microplásticos em rios da Região de São Carlos-SP e na Bacia Hidrográfica do Rio Jundiá-SP. A caracterização dos microplásticos e sua distribuição espaço-temporal em regiões de mananciais irá permitir o estabelecimento do cenário da distribuição ambiental deste contaminante nas regiões estudadas. Este pesquisador, uma aluna de doutorado, MSc Natali da Silva Schio e o Dr. Guilherme M. Grosseli, pesquisador colaborador, participou presencialmente do Workshop.	
Pesquisador	
<b>Roberta Urban</b>	<b>Universidade Federal de São Carlos (UFSCAR)</b>
<b>Atividade associadas ao projeto:</b> Foram realizadas amostragens de microplásticos tanto em ambientes aquáticos quanto atmosféricos. Estas amostras foram caracterizadas fisicamente (espectroscopia óptica) e quimicamente (micro-FTIR e micro-Raman). Além disso, foram preparados microplásticos ambientalmente relevantes a partir de plásticos coletados no ambiente e testes toxicológicos estão sendo realizados. Ademais, os alunos participaram presencialmente do Workshop, enquanto a pesquisadora participou on-line. A pesquisadora apresentou ainda uma palestra relacionada ao tema no evento Projeto Inspiração Jovens Pesquisadores, realizado à distância pelo CRQ-IV/SP no dia 28 de março de 2023.	
<b>Equipe: Participantes externos ao INCTAA</b>	
<b>Walter Ruggeri Waldman</b>	<b>Universidade Federal de São Carlos (UFSCar)</b>
<b>Atividade associadas ao projeto:</b> Caracterização de microplásticos por técnicas espectroscópicas, customização de processos de separação de microplásticos, preparação de microplásticos ambientalmente relevantes.	
Ações realizadas dentro da temática do projeto:	

Realização de Workshop na cidade de Campinas no período de 20 a 22 de maio de 2023. Participação de forma presencial e virtual de todos os pesquisadores do projeto e diversos alunos de graduação e pós-graduação. O evento contou com um total de 40 participantes;

Intercâmbio entre alunos de diferentes instituições;

Troca de experiência de protocolos de coleta e separação de microplásticos em corpos aquáticos.

### **Atividades que contemplaram a colaboração entre pesquisadores ou grupos do INCTAA (artigos, trabalhos congressos, entre outros):**

#### **Artigos:**

Carvalho, J. S., do Nascimento, R. D. K. S., da Rosa Ferreira, J. V. F., da Rosa, N. L. C., Grosseli, G. M., Fadini, P. S., & Urban, R. C. (2023). Source apportionment and health impact assessment of atmospheric particulate matter in the city of São Carlos, Brazil. *Chemosphere*, 326, 138450.

#### **Trabalhos em congressos:**

Occurrence of emerging contaminants and microplastics in distinct river basins (urbanized and rural) in the State of São Paulo, Brazil; Vinicius Sarracini Santos, Altair Benedito Moreira, Marcia Cristina Bisinoti, Cassiana Carolina Montagner; SETAC EUROPE 33RD ANNUAL MEETING – DUBLIN – IRLAND (2023); poster presentation.

Occurrence and risk assessment of emerging contaminants in agricultural and urban hydrographic basins – similarities and differences among the human activities; Vinicius Sarracini Santos; Altair Benedito Moreira; Marcia Cristina Bisinoti, Cassiana Carolina Montagner; UNESCO-IWRA Online Conference “Emerging Pollutants: Protecting Water Quality for the Health of People and the Environment” (2023); poster presentation.

Towards a fast characterization method for large sampling high throughput microplastics identification; Cristiane Vidal; Vinicius Sarracini Santos, Cassiana C. Montagner, Celio Pasquini; UNESCO-IWRA Online Conference “Emerging Pollutants: Protecting Water Quality for the Health of People and the Environment” (2023); poster presentation.

Gomes, R. S.; Waldman, W. R.; Fernandes, A. N. Use of carbonyl index in monitoring polymer degradation: the case of polypropylene. In: 45ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2022. (Apresentação: Pôster).

Leão, M. B.; Grassi, M. T.; Jauris, C. F. M.; Fernandes, A. N. A new binding agent for sampling atenolol with diffusive gradients in thin-film devices. In: 45ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2022. (Apresentação: Pôster).

Lara, L. Z.; Bertoldi, C.; Waldman, W. R.; Fernandes, A. N. Sorption of estriol (E3) in pristine and photodegraded polyamide microplastics and the influence of fulvic acid on the interaction. In: LatinXChem, 2022. (Apresentação: Pôster).

Leão, M. B.; Grassi, M. T.; Jauris, C. F. M.; Fernandes, A. N. A new binding agent for sorption of propranolol in o-DGT samplers. In: LatinXChem, 2022. (Apresentação: Pôster).

Gomes, R. S.; Waldman, W. R.; Fernandes, A. N. Structural modification of degradable bags submitted to different abiotic experimental conditions: A preliminary study. In: LatinXChem, 2022. (Apresentação: Pôster).

Fonseca, V. F.; Dias, M. A.; Montagner, C.; Bertoldi, C.; Fernandes, A. N. Investigation of the presence of microplastics and organic contaminants in the estuarine zone of river Tramandaí. In: LatinXChem, 2022. (Apresentação: Pôster).

Lara, L. Z.; Bertoldi, C.; Waldman, W. R.; Fernandes, A. N. Characterization of photodegraded polyamide microplastics and its influence on the sorption of E3 in simulated conditions. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022. (Apresentação: Pôster).

Leão, M. B.; Grassi, M. T.; Jauris, C. F. M.; Fernandes, A. N. Development of 3D graphene-based o-DGT devices for propranolol sampling. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022. (Apresentação: Oral e pôster).

Fonseca, V. F.; Dias, M. A.; Montagner, C.; Bertoldi, C.; Fernandes, A. N. Preliminary study concern the presence of microplastics and organic contaminants in the estuarine zone of River Tramandaí. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022. (Apresentação: Pôster).

Duarte, E. S. A.; Dias, M. A.; Montagner, C.; Bertoldi, C.; Fernandes, A. N. Microplastics and organic contaminants on the surface water of River Guaíba. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022. (Apresentação: Pôster).

Gomes, R. S.; Waldman, W. R.; Fernandes, A. N. Preliminary study of structural modification of degradable bags submitted to different abiotic experimental conditions. In: 20º Encontro Nacional de Química Analítica e 8º Congresso Ibero-Americano de Química Analítica, 2022. (Apresentação: Pôster).

**Atividades e resultados que contemplaram colaborações entre INCTs (artigos, trabalhos congressos, entre outros):**

**Atividade associadas ao projeto:**

Trabalhos de divulgação científica com palestras em escola pública e vídeo de divulgação:

Canela, M.C. – Os danos do microplástico ao meio ambiente. Série de vídeos para divulgação científica, Programa Tom da Ciência – 1- <https://youtu.be/pWMHQiNBc8o>, 1- [https://youtu.be/\\_GljgtRd3W8](https://youtu.be/_GljgtRd3W8), [https://youtu.be/XV\\_li3\\_YXPg](https://youtu.be/XV_li3_YXPg), 2023. Projeto de extensão da UENF.

Canela, M.C. Palestra: Dos Plásticos aos microplásticos: O que eu tenho que ver com isso? Colégio Estadual Nelson Pereira Rebel, 2023, Campos dos Goytacazes-RJ, Brasil.

Fernandes, A. N. - Uma oficina para repensar a poluição plástica: das ilhas de lixo oceânicas à ameaça dos microplásticos. Colégio Luterano Concórdia - Canoas/RS, 2023. Projeto de extensão da UFRGS.

Fernandes, A. N. - Do Monte Everest ao corpo humano: microplásticos invisíveis e inegáveis. Portas Abertas da UFRGS 2023, Porto Alegre-RS.



**APÊNDICE IV**



**Instituto Nacional de Ciências e Tecnologias  
Analíticas Avançadas – INCTAA**

<https://www.inctaa.org/>

**Universidade de Brasília – UnB**

<https://www.unb.br/>

**Grupo de Automação, Quimiometria e Química  
Ambiental – AQQUA/UnB**

<https://www.aqqua.unb.br/>

**Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico  
e Tecnológico – CNPq**

**Coordenação do INCTAA**

Prof. Dr. Celio Pasquini

**Coordenação Geral do Projeto**

Prof. Dr. Fernando Fabríz Sodré

**Núcleo UNB**

Dra. Hadassa de Souza Ramos Pontes Moura

Dr. Luiz Eduardo Thans Gomes

MSc. Antonio Pedro N. Guimarães

**Núcleo Polícia Federal**

INC/DITEC/PF - PCF Adriano Otávio Maldaner

SR/PF/PB - PCF César Silvino Gomes

**Núcleo UFSCar**

Prof. Dr. Pedro Sérgio Fadini

**Núcleo UFRGS**

<https://www.gov.br/cnpq/pt-br>

**Ministério da Cidadania**

<https://www.gov.br/cidadania/pt-br>

**Secretaria Nacional de Cuidados e Prevenção às  
Drogas**

<https://www.gov.br/cidadania/pt-br/composicao/desenvolvimento-social/senapred>

Profa. Dra. Andreia Neves Fernandes

**Instituições Parceiras**

*CAESB - Brasília*

Ana Maria do Carmo Mota

Leandro da Silva Cavalcante

*CAGEPA - João Pessoa*

Michele Mendonça Fonseca

*CAERN - Natal*

Valéria Correia Silva Abreu

*DMAE – Porto Alegre*

Raul Oliveira da Rosa

*SAAE - São Carlos*

Monica Cristina de Assis Abílio

**Apoio**

*Projeto CLOACINA*

Secretaria Nacional de Políticas Sobre Drogas  
(SENAD)

Ministério da Justiça e Segurança Pública (MJSP)

# 1 APRESENTAÇÃO

A produção e consumo de drogas de abuso impactam a sociedade em termos de saúde, educação e segurança pública. De modo a subsidiar políticas públicas sobre drogas, dados de sensores, entrevistas, apreensões de drogas e internações clínicas têm sido usados para inventariar a presença das drogas nas cidades, bem como seus padrões de consumo.

É nesse cenário que a *Epidemiologia baseada no Esgoto* se apresenta como uma estratégia complementar para estimar a presença de drogas em cidades. Baseia-se na identificação e quantificação de substâncias químicas resultantes do consumo e/ou manipulação de drogas em amostras de esgotos produzidos por uma comunidade. Tais biomarcadores possuem relação direta com a exposição de pessoas a diferentes tipos de drogas

A partir de amostras de esgoto bruto, coletadas na entrada de estações de tratamento de esgotos (ETE), são executadas diferentes etapas buscando isolar biomarcadores de interesse e quantificá-los por meio de instrumentação analítica apropriada. Assim, os resultados produzidos na análise química, juntamente com dados acessórios relacionados à quantidade de esgoto produzida por uma população, permitem estimar o consumo de drogas de modo empírico e não intrusivo, preservando o anonimato de indivíduos.

O Projeto *Estimativa do Consumo de Drogas Ilícitas em Cidades Brasileiras via Análise de Esgotos*, apoiado pela SENAPRED/Ministério da Cidadania, busca ampliar os estudos de **Epidemiologia Baseada no Esgoto** para diferentes regiões do Brasil por meio do estabelecimento de uma rede de pesquisadores e colaboradores.

Neste primeiro Boletim são apresentadas estimativas do consumo de cocaína, *cannabis* (maconha), ecstasy e heroína em cinco regiões brasileiras: Distrito Federal (DF), Natal (RN), João Pessoa (PB), Porto Alegre (RS) e São Carlos (SP).

## 2 MÉTODOS

Com o apoio de diferentes companhias de saneamento, foram obtidas, na entrada de 13 ETEs, amostras compostas, proporcionais ao tempo ou a vazão, durante 24 h, por sete dias consecutivos. A Tabela 1 traz detalhes sobre os pontos amostrais e o período amostral.

*Tabela 1. Cidades investigadas e ETE participantes*

Região/Cidade	ETE	Data
Distrito Federal	Brasília Norte	09/03 a 15/03/22
	Brasília Sul	
	Gama	
	Melchior	
	Planaltina	
	Riacho Fundo	
	Samambaia	
	São Sebastião	
Natal	Baldo	09/03 a 15/03/22
João Pessoa	Mangabeira	13/04 a 19/04/22
Porto Alegre	Sarandi	09/03 a 15/03/22
	Serraria	
São Carlos	Monjolinho	27/04 a 03/05/22

Durante o período amostral, alíquotas das amostras foram filtradas, acidificadas e congeladas. Antes da análise, foram descongeladas, tiveram seu pH ajustado, foram enriquecidas com padrões internos e submetidas a extração em fase sólida, com cartuchos comercialmente disponíveis, de modo a isolar os biomarcadores de interesse, mostrados na Tabela 2.

Tabela 2. Biomarcadores utilizados para estimar o consumo de drogas

Biomarcador	Descrição
Benzoilecgonina (BE)	Metabolito para estimar o consumo de cocaína
MDMA <i>3,4-metilenodioximetanfetamina</i>	Estimulante anfetamínico associado ao ecstasy
MDA <i>3,4-metilenodioxianfetamina</i>	Composto homólogo ao MDMA
Carboxi-THC (THC-COOH) <i>11-nor-9-carboxi-Δ9-tetrahidrocannabinol</i>	Metabolito para estimar o consumo de cannabis
6-acetilmorfina (6-AM)	Metabolito para estimar o consumo de heroína

As extrações foram realizadas em cada cidade alvo e, com exceção de Brasília, os cartuchos foram enviados despachados para a UnB onde as análises foram finalizadas. Após obtenção de extratos concentrados, os biomarcadores foram quantificados por cromatografia líquida acoplada à espectrometria de massas.

### 3 ESTIMATIVAS DE CONSUMO

Neste boletim, o consumo per capita de diferentes drogas é apresentado em gramas por mil habitantes por dia (g/1000hab/dia) e foi calculado segundo a equação abaixo.

$$C = \frac{c \times Q_v \times f}{hab}$$

Onde é  $c$  a concentração (m/v) do biomarcador no esgoto,  $Q_v$  é a vazão volumétrica do esgoto no ponto amostral (L/dia),  $f$  é em um fator relativo à proporção da droga metabolizada e excretada após o consumo e  $hab$  é o número de habitantes atendidos pela respectiva ETE.

### 4 RESULTADOS

A Tabela 3 mostra a concentração média dos biomarcadores nas amostras coletadas em cada ETE durante o período amostral.

*Tabela 3. Concentração média dos biomarcadores, em µg/L, nas amostras de esgoto coletadas nas 13 estações de tratamento de esgoto investigadas*

Cidade	ETE	BE	MDA	MDMA	THC-COOH	6AM
Brasília	Brasília Norte	4,15 ± 0,06	ND*	ND	8,3 ± 0,3	ND
	Brasília Sul	3,06 ± 0,06	ND*	ND	4,7 ± 0,4	ND
	Gama	6,27 ± 0,05	ND*	ND	5,9 ± 0,6	ND
	Melchior	5,23 ± 0,07	ND*	ND	2,7 ± 0,5	ND
	Planaltina	9,44 ± 0,06	ND*	ND	6,6 ± 0,7	ND
	Riacho Fundo	7,14 ± 0,06	ND*	ND	8,0 ± 0,9	ND
	Samambaia	6,57 ± 0,05	ND*	ND	13,2 ± 0,3	ND
	São Sebastião	2,62 ± 0,06	ND*	ND	3 ± 1	ND
João Pessoa	Mangabeira	11,40 ± 0,03	ND*	ND	13,6 ± 0,4	ND
Natal	Baldo	3,97 ± 0,04	ND*	ND	19,0 ± 0,4	ND
Porto Alegre	Sarandi	5,71 ± 0,07	ND*	ND	15,4 ± 0,2	ND
	Serraria	4,41 ± 0,05	ND*	ND	10,4 ± 0,1	ND
São Carlos	Monjolinho	1,10 ± 0,08	ND*	ND	4 ± 1	ND

ND: Não detectado. \*Análise confirmatória pendente

Com base nas concentrações dos biomarcadores em cada amostra, foi possível estimar o consumo referente a população atendida por cada ETE, com exceção de Natal, onde os dados de vazão volumétrica do esgoto afluyente não puderam ser obtidos de modo confiável e estão sendo submetidos a reavaliação.

## 5 CONSUMO DE COCAÍNA

A Figura 1 mostra a estimativa do consumo médio de cocaína nas ETEs investigadas. O consumo foi estimado utilizando um fator  $f$  de 4,19 (Sodré et al. 2018), referente a taxa de excreção urinária de BE, avaliada em 25% (Castiglioni et al. 2013) e considerando a ponderação referente a forma de administração, sendo de 70:30 para as formas intranasal (cloridrato de cocaína) e crack (base livre) respectivamente (Laranjeira et al., 2014).

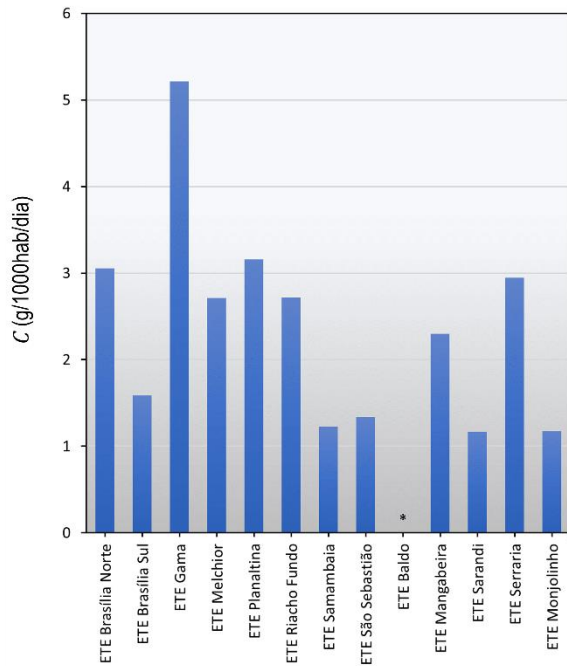


Figura 1. Estimativa do consumo de cocaína, com BE como biomarcador, nas ETEs investigadas. \*Dados de vazão volumétrica sob reavaliação

Observam-se, na Figura 1, estimativas de consumo de cocaína variando entre 1 e 5 g/1000hab/dia nas regiões atendidas por diferentes ETEs. Os valores obtidos são similares ao anteriormente encontrados em diferentes ETEs do Distrito Federal (Maldaner et al. 2012; da Silva et al. 2018; Sodré et al. 2018, 2022). São também compatíveis com estimativas de consumo produzidas em países das Américas do Sul e Central (Devault et al. 2014; Bijlsma et al. 2016; Causanilles et al. 2017) e superiores aos reportados em países da Europa (EMCDDA 2022).

O perfil semanal de consumo de cocaína também foi estimado em todas as ETEs investigadas por meio da análise de amostras compostas coletadas durante 24 h em cada dia da semana. A Figura 2 mostra a variação semanal do consumo de cocaína estimado para a população atendida em diferentes ETEs do DF.

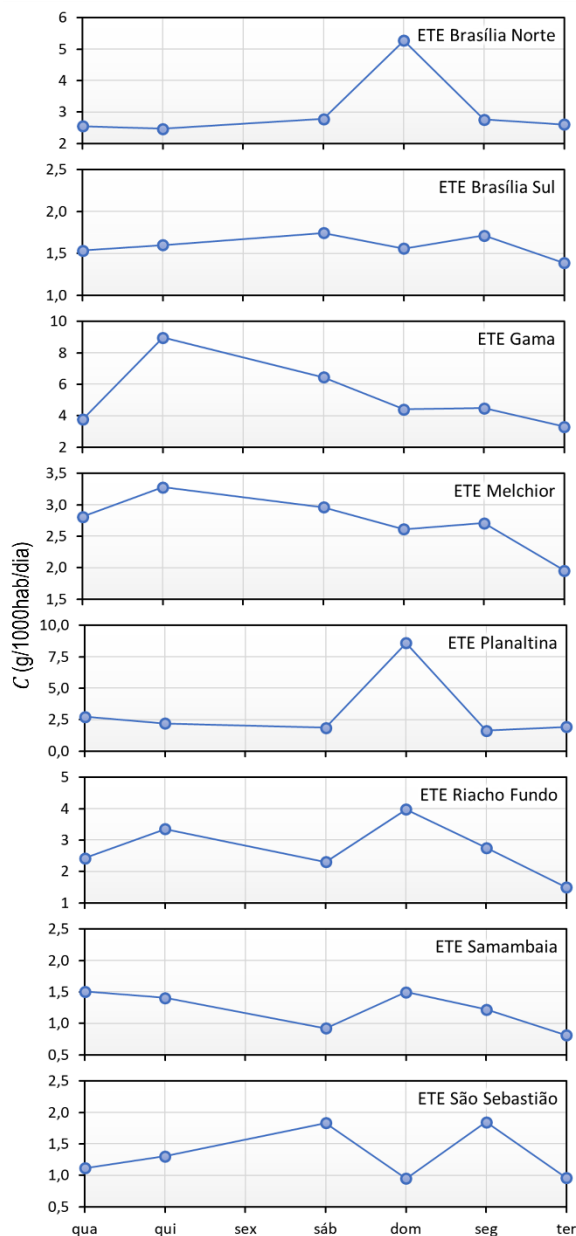


Figura 2. Estimativa do perfil semanal do consumo de cocaína nas regiões atendidas pelas oito ETEs investigadas no Distrito Federal

No Distrito Federal, foi possível observar padrões de consumo elevados nos finais de semana nas regiões atendidas pelas ETEs Brasília Norte, Planaltina e Riacho Fundo. Este comportamento já foi previamente observado na região atendida pela ETE Brasília Norte (da Silva et al. 2018; Sodré et al. 2018) e tem sido atribuído ao uso recreativo da cocaína como estimulante. Nas demais ETEs investigadas foi observado um perfil de consumo diferenciado, como valores constantes ao longo da semana investigada ou com valores mais elevados durante dias da semana.

O perfil semanal do consumo de cocaína estimado para a região atendida pela ETE Mangabeira, em Natal (Figura 3), também apresentou padrão constante.



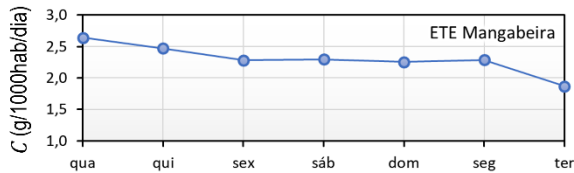


Figura 3. Estimativa do perfil semanal do consumo de cocaína nas regiões atendidas pela ETE investigada na cidade de Natal

Nas regiões atendidas pelas ETEs Sarandi e Serraria, ambas de Porto Alegre (Figura 4), observou-se consumo mais elevado de cocaína logo após o final de semana.

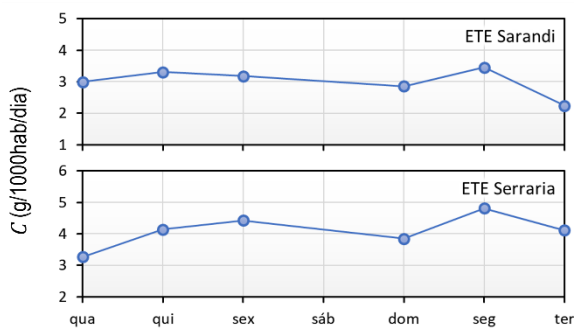


Figura 4. Estimativa do perfil semanal do consumo de cocaína nas regiões atendidas pelas duas ETEs investigadas na cidade de Porto Alegre

Para a população de São Carlos, atendida pela ETE Monjolinho (Figura 5), estimou-se consumo mais elevado no final de semana, mas também na quarta-feira, primeiro dia da campanha amostral.

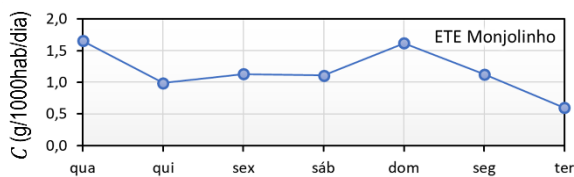


Figura 5. Estimativa do perfil semanal do consumo de cocaína nas regiões atendidas pela ETE investigada na cidade de São Carlos.

A Figura 6 mostra a estimativa do consumo médio de cocaína nas diferentes regiões. Observou-se consumo similar em todas as regiões, com exceção da cidade de São Carlos, onde o consumo de cocaína foi cerca de metade do consumo estimado nas demais cidades.

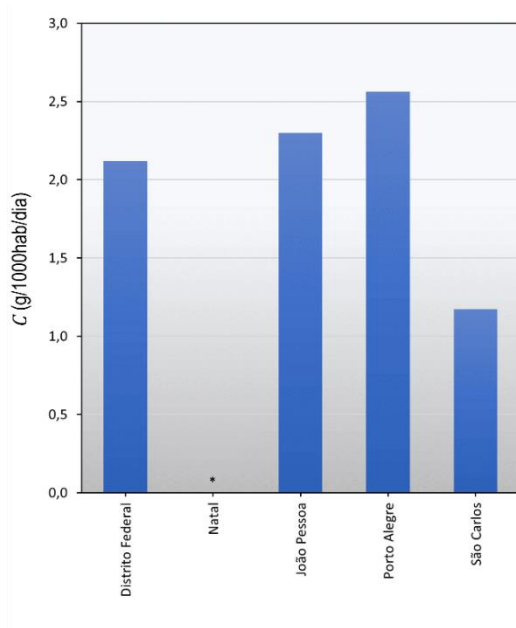


Figura 6. Estimativa do consumo médio de cocaína, com BE como biomarcador, nas regiões investigadas. Estimativas para Porto Alegre e Distrito Federal normalizadas pela população atendida em cada ETE investigada \*Dados de vazão volumétrica sob reavaliação.

## 6 CONSUMO DE CANNABIS

Para estimar o consumo de Cannabis, foi utilizado fator  $f$  de 182, que considera a taxa de exceção urinária de 0,5% para o metabólito do THC, o Carboxi-THC (THC-COOH) mediante administração da droga via pulmonar (Gracia-Lor et al. 2016). A Figura 6 mostra a estimativa do consumo de *cannabis* nas ETEs investigadas.

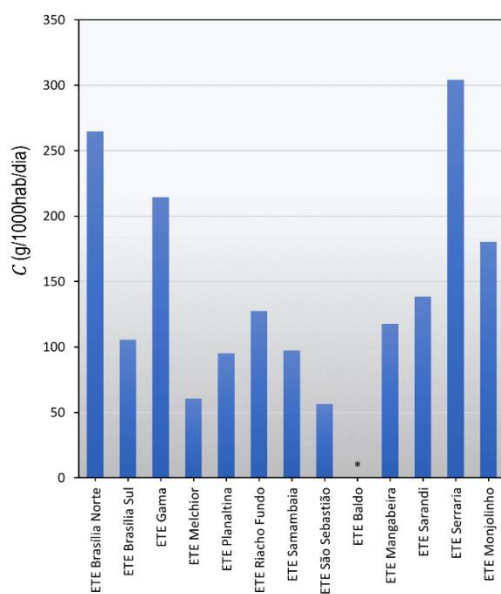


Figura 7. Estimativa de consumo de Cannabis, com THC-COOH como biomarcador, nas ETEs investigadas. \*Dados de vazão volumétrica sob reavaliação

As estimativas de consumo de cannabis variaram entre 50 e 300 g/1000hab/dia nas regiões atendidas por diferentes ETEs. Os valores obtidos são superiores ao anteriormente encontrados em duas ETEs do Distrito Federal (Sodré et al. 2022). São também superiores às estimativas produzidas outros países da Europa (EMCDDA 2022), além dos Estados Unidos e Austrália Devido aos elevados valores obtidos, as amostras deverão ser reanalisadas para fins confirmatórios empregando-se outros instrumentos analíticos. Os resultados poderão então ser revisitados.

O perfil semanal de consumo de cannabis também foi estimado em todas as ETEs investigadas por meio de amostras compostas coletadas diariamente, durante o período de 24 h. A Figura 8 mostra os perfis semanais do consumo de cannabis estimado para a população atendida por diferentes ETEs do DF.

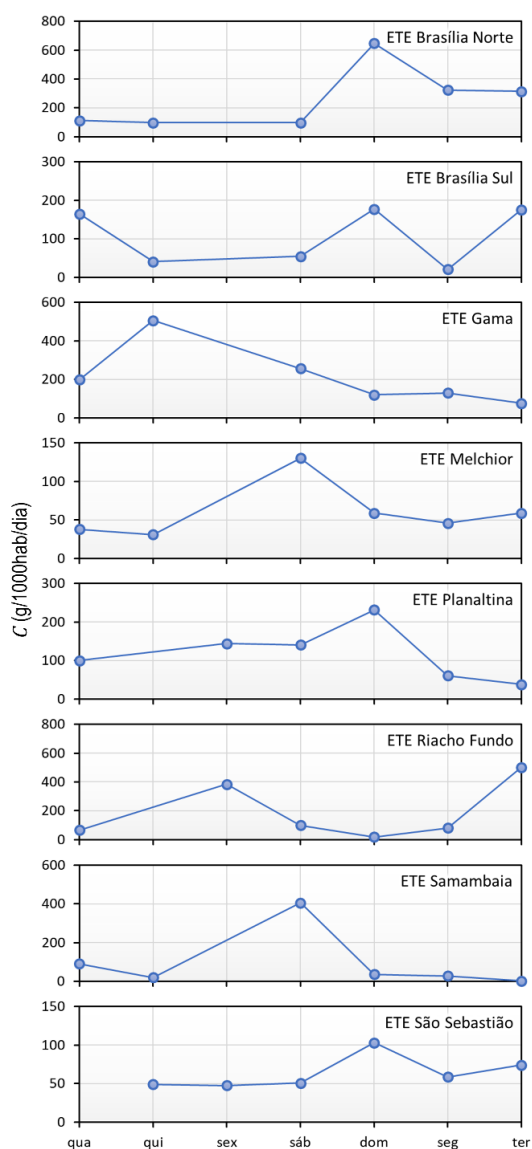


Figura 8. Estimativa do perfil semanal do consumo de cannabis nas regiões atendidas pelas oito ETEs investigadas no Distrito Federal

Foi possível observar padrões de consumo superiores nos finais de semana nas regiões atendidas pelas ETEs Brasília Norte, Melchior, Planaltina, Samambaia e São Sebastião. Este comportamento, embora já descrito na literatura, não é usual haja visto que a cannabis não é comumente associada ao uso recreativo, mas sim ao uso constante, independente de atividades sociais. Nas demais ETEs investigadas foram observados perfis com consumos superiores em diferentes dias da semana.

Na cidade de Natal, o perfil estimado do consumo de cannabis (Figura 9) apresentou valores superiores na sexta-feira, evidenciando o efeito associado ao uso preferencial no final de semana.

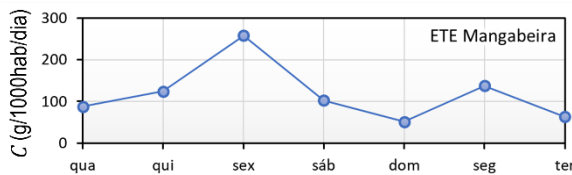


Figura 9. Estimativa do perfil semanal do consumo de cannabis nas regiões atendidas pela ETE investigada na cidade de Natal

A estimativa do consumo semanal de cannabis nas regiões atendidas pelas ETEs Sarandi e Serraria, em Porto Alegre (Figura 10) também revelou um padrão constante, com consumos levemente superiores em dias da semana

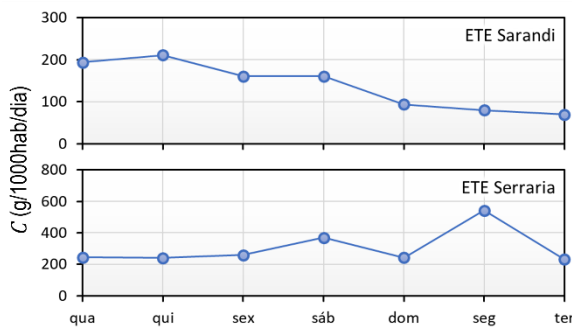


Figura 10. Estimativa do perfil semanal do consumo de cannabis nas regiões atendidas pelas duas ETEs investigadas na cidade de Porto Alegre

Em São Carlos, a região atendida pela ETE Monjolinho (Figura 11), apresentou perfil estimado do consumo de cannabis valores mais elevados na sexta-feira, evidenciando novamente o um possível uso preferencial durante o final de semana.

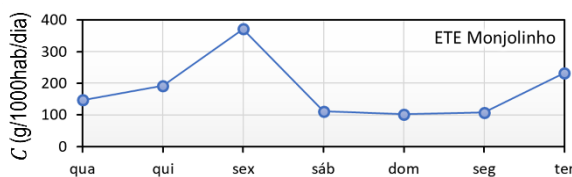


Figura 11. Estimativa do perfil semanal do consumo de cannabis nas regiões atendidas pela ETE investigada na cidade de São Carlos.

Na Figura 12, a estimativa média, por região investigada, revelou maiores consumos de cannabis para Porto Alegre, seguido de São Carlos e das demais regiões investigadas.

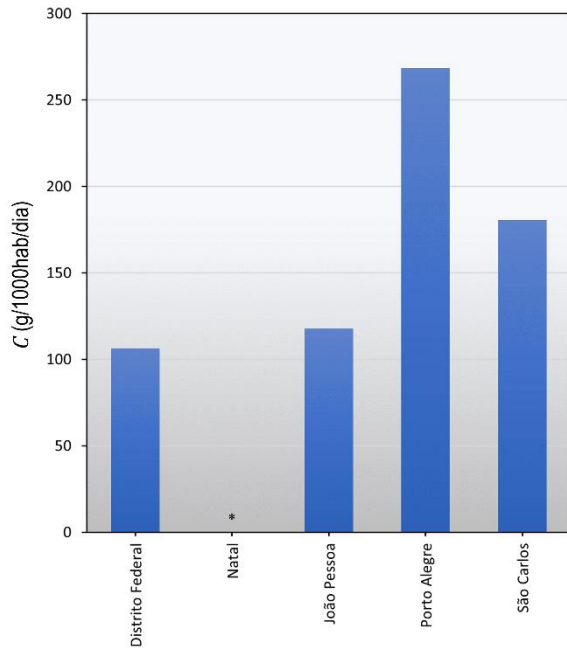


Figura 12. Estimativa do consumo médio de cannabis, com BE como biomarcador, nas regiões investigadas. Estimativas para Porto Alegre e Distrito Federal normalizadas pela população atendida em cada ETE investigada \*Dados de vazão volumétrica sob reavaliação.

## 7 DESTAQUES

Conforme apontado pelo III Levantamento Nacional sobre o Uso de Drogas pela População Brasileira, houve prevalência no consumo de cannabis em todas as cidades investigadas. Ressalvas para as estimativas de consumo de Natal devido a necessidade de reavaliar as vazões volumétricas da ETE investigada.

Dentre as dificuldades apresentadas para a obtenção dos resultados, podem ser citadas a necessidade de medições acuradas da vazão volumétrica do esgoto que afluí no ponto amostral, bem como obtenção de estimativas mais assertivas quanto a população atendida pelas ETEs investigadas.

Dados mais refinados poderiam ser produzidos a partir de informações sobre a pureza média das drogas vendidas nas ruas das cidades investigadas e sobre as faixas etárias prevalentes em cada região atendida por diferentes ETEs. Neste sentido, novos biomarcadores associados ao estilo de vida das pessoas no meio urbano estão sendo incorporados ao método. Ainda, novas reuniões com os representantes das empresas de saneamento deverão contribuir para elucidar questões relativas a obtenção de dados acessórios e importantes na epidemiologia baseada no esgoto para drogas de abuso.

## 8 REFERÊNCIAS

- Bijlsma L, Botero-Coy AM, Rincón RJ, et al (2016) Estimation of illicit drug use in the main cities of Colombia by means of urban wastewater analysis. *Sci Total Environ* 565:984–993. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2016.05.078>
- Castiglioni S, Bijlsma L, Covaci A, et al (2013) Evaluation of Uncertainties Associated with the Determination of Community Drug Use through the Measurement of Sewage Drug Biomarkers. *Env Sci Technol* 47:1452–1460. <https://doi.org/10.1021/es302722f>
- Causanilles A, Ruepert C, Ibáñez M, et al (2017) Occurrence and fate of illicit drugs and pharmaceuticals in wastewater from two wastewater treatment plants in Costa Rica. *Sci Total Environ* 599–600:98–107. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.04.202>
- da Silva KM, Quintana JB, González-Mariño I, et al (2018) Assessing cocaine use patterns in the Brazilian Capital by wastewater-based epidemiology. *Int J Environ Anal Chem* 98:1370–1387. <https://doi.org/10.1080/03067319.2018.1554743>
- Devault DA, Néfau T, Pascaline H, et al (2014) First evaluation of illicit and licit drug consumption based on wastewater analysis in Fort de France urban area (Martinique, Caribbean), a transit area for drug smuggling. *Sci Total Environ* 490:970–978. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2014.05.090>
- EMCDDA (2022) Wastewater analysis and drugs: a European multi-city study. Lisbon
- FIOCRUZ (2017) III Levantamento Nacional sobre o Uso de Drogas pela população brasileira
- González-Mariño I, Estévez-Danta A, Rodil R, et al (2019) Profiling cocaine residues and pyrolytic products in wastewater by mixed-mode liquid chromatography–tandem mass spectrometry. *Drug Test Anal* 11:1018–1027. <https://doi.org/10.1002/dta.2590>
- Gracia-Lor E, Zuccato E, Castiglioni S (2016) Refining correction factors. for back-calculation of illicit drug use. *Sci Total Environ* 573:1648–1659. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2016.09.179>
- Maldaner AO, Schmidt LL, Locatelli MAF, et al (2012) Estimating cocaine consumption in the Brazilian federal district (FD) by sewage analysis. *J Braz Chem Soc* 23:861–867. <https://doi.org/10.1590/S0103-50532012000500011>
- Sodré FF, Feitosa RS, Jardim WF, Maldaner AO (2018) Wastewater-based epidemiology of cocaine in the Brazilian Federal District: spatial distribution, weekly variation and sample preservation strategies. *J Braz Chem Soc* 29:2287–2298. <https://doi.org/10.21577/0103-5053.20180105>
- Sodré FF, Freire D de JS, Alcântara DB, Maldaner AO (2022) Understanding Illicit Drug Use Trends During the Carnival Holiday in the Brazilian Capital Through Wastewater Analysis. *Front Anal Sci* 2:1–12. <https://doi.org/10.3389/frans.2022.930480>

*Brasília, 12 de setembro de 2022*



## APÊNDICE V

<b>Período: 01/06/2022 a 30/06/2023</b>	
<b>TEMA DE PESQUISA: Nanomateriais no Desenvolvimento de Métodos Analíticos de Alta Sensibilidade</b>	
<b>RESUMO:</b> O projeto propõe o desenvolvimento de nanopartículas de calcogenetos de prata, cobre, ternários (Ag, Cu e In), bem como impressão 3D de redes metalorgânicas (MOF) e nanopartículas (upconversion), produção de suportes poliméricos e nanofibras a partir de eletrofiação 3D contendo nanopartículas para aplicação na intensificação de espalhamento Raman (SERS), absorção no infravermelho (SEIRA) e LIBS (Laser Induced Breakdown Spectroscopy), além de medidas luminescentes e eletroluminescentes, visando o estabelecimento de métodos analíticos de alta sensibilidade. Dentre os analitos de interesse estão ânions como bicarbonato ( $\text{HCO}_3^-$ ), carbonato ( $\text{CO}_3^{2-}$ ), bissulfato ( $\text{HSO}_4^-$ ) e sulfato ( $\text{SO}_4^{2-}$ ) (demanda da Petrobras), pesticidas (demanda EMBRAPA Semiárido) e outros contaminantes em alimentos, íons metálicos e hidrocarbonetos decorrentes do derramamento de óleo cru ocorrido no litoral brasileiro no ano de 2019, entre outros contaminantes ambientais.	
<b>Coordenador:</b>	
<b>Claudete Fernandes Pereira</b>	<b>Universidade Federal de Pernambuco (UFPE)</b>
<b>Atividade associadas ao projeto:</b>	
Desenvolvimento de métodos SERS e SEIRA utilizando materiais nanoestruturados.	
<b>Equipe - Participantes INCTAA:</b>	
<b>Ivo Milton Raimundo Júnior</b>	<b>Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)</b>
<b>Atividade associadas ao projeto:</b>	
Desenvolvimento de métodos SERS e LIBS utilizando os materiais nanoestruturados.	
<b>Ana Paula Silveira Paim</b>	
<b>Universidade Federal de Pernambuco (UFPE)</b>	
<b>Atividade associadas ao projeto:</b>	
Impressão 3D de redes metalorgânicas (MOF) e nanopartículas (upconversion), produção de suportes poliméricos e nanofibras a partir de eletrofiação 3D.	
<b>Maria da Conceição Branco</b>	
<b>Universidade do Porto-Portugal</b>	
<b>Atividade associadas ao projeto:</b>	

Impressão 3D de redes metalorgânicas (MOF) e nanopartículas (upconversion), produção de suportes poliméricos e nanofibras a partir de eletrografia 3D.	
<b>Equipe: Participantes externos ao INCTAA</b>	
<b>Giovannia Pereira</b>	<b>Universidade Federal de Pernambuco (UFPE)</b>
<b>Atividade associadas ao projeto:</b> Desenvolvimento das sínteses dos materiais nanoestruturados.	
<b>Severino Alves Júnior:</b>	<b>Universidade Federal de Pernambuco (UFPE)</b>
<b>Atividade associadas ao projeto:</b> Desenvolvimento das sínteses das MOFs 3D e suportes poliméricos.	
<b>Ações realizadas dentro da temática do projeto:</b>  Foram sintetizados materiais nanoestruturados de prata (nanopartículas de prata e quantum dots de seleneto de prata), estabilizadas com diferentes reagentes, tais como ácido 3-mercaptopropiônico, Polivinilpirrolidona (PVP) e Álcool polivinílico (PVA). Além dessas, também foram sintetizados quantum dots de seleneto de cobre estabilizados com ácido mercaptosuccínico.  Tais materiais a experimentos LIBS, SERS e SEIRA mostrando resultados bastante promissores.  Reuniões mensais vêm sendo realizadas para acompanhamento das atividades.	
<b>Atividades que contemplaram a colaboração entre pesquisadores ou grupos do INCTAA (artigos, trabalhos congressos, entre outros):</b>  Souza, F.L.A.; Amorim, C.G.; Araújo, A.N.; Šatínský, D.; Paim, A.P.S.; Montenegro, M.C. B. S. M. Malachite Green Optical Sensor Based on Electrospun Polyimide Nanofiber. Chemosensors 10 (9) (2022) 348-361. <a href="https://doi.org/10.3390/chemosensors10090348">https://doi.org/10.3390/chemosensors10090348</a>  Costa, J. B. S.; Silva, F.A.O.; Trindade, F.C.S.; Lavorante, A.F.; Gomes, D.F.; Figueiredo, J.F.D.; Paim, A.P.S. Sensor film based on electrical resistance of graphene nanoplatelets and polystyrene (XGNP/PS): fabrication, characterization,	

and application. Journal of Materials Science: Materials in Electronic, 33 (2022) 14927–14937. <https://doi.org/10.1007/s10854-022-08409-0>

**Atividades e resultados que contemplaram colaborações entre INCTs (artigos, trabalhos congressos, entre outros):**

Cunha, F., Santos-Sobrinha, I., Pereira, Giovannia, Pereira, C., SURFACE-ENHANCED INFRARED ABSORPTION SPECTROSCOPY (SEIRA) WITH UNIVERSAL ATTENUATED TOTAL REFLECTANCE (UATR) ACCESSORY”, Poster, 20th ENQA - Brazilian Meeting on Analytical Chemistry and 8th CIAQA -Congresso Ibero-Americano de Química Analítica from September 25 to 28th, 2022. (INCT-info);

VIEGAS, ISABELLE M. A.; GONÇALVES, INGRID W. V.; SANTOS, BEATE S.; FONTES, ADRIANA; PEREIRA, MARIA GORETI C.; PEREIRA, CLAUDETE F.; PEREIRA, GIOVANNIA A. L. Synthesis of hydrophilic Ag<sub>2</sub>Se quantum dots optically optimized by multivariate strategies: an easy one-pot approach. NEW JOURNAL OF CHEMISTRY, v.46, p.21864 - 21874, 2022.

## APÊNDICE VI

<b>Período: 01/06/2022 a 15/06/2023 (início da atividade: 01/03/2023)</b>	
<b>TEMA DE PESQUISA: Valorização de produtos agropecuários</b>	
<p>RESUMO: <i>Haemonchus contortus</i> é o nematódeo gastrointestinal (NGI) de maior prevalência e importância em pequenos ruminantes, por reduzir os valores de volume globular (VG), causando anemia. O diagnóstico precoce da infecção por NGI pode ser utilizado para o tratamento seletivo direcionado (TST) de ovinos, reduzindo o uso de antiparasitários e a resistência anti-helmíntica. Estudos anteriores (Santos et al., 2023) realizados na Embrapa demonstraram a viabilidade do desenvolvimento de modelos empregando equipamento portátil por espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS) para predição do VG e também diagnóstico da infecção dos ovinos por NGI. No entanto, o estudo foi limitado a uma única raça (Morada Nova), para borregos em crescimento. Também não foram estudadas as alterações ocorridas no sangue em resposta às infecções sofridas pelos animais, que por sua vez estão associadas às variações que podem ser observadas pela espectroscopia NIR e fundamentam os modelos. Assim, o objetivo principal das atividades propostas é ampliar os modelos de calibração NIRS para predição de VG e diagnóstico da infecção de ovinos de várias raças e idades, criados a pasto, a partir da análise multivariada de dados coletados diretamente no sangue. Também serão estudadas as associações entre os parâmetros do hemograma com as informações contidas nos espectros com o objetivo de avaliar a capacidade de diagnóstico e também de prognóstico da espectroscopia NIR. A transferência de modelo entre equipamentos de diferentes fabricantes também será avaliada, como estratégia de difundir os modelos gerados. Espera-se obter modelos robustos que possam ser usados à campo, favorecendo o TST de ovinos. Os trabalhos experimentais estão em execução na Embrapa Pecuária Sudeste, onde estão em avaliação animais infectados tanto de maneira artificial quanto naturalmente. A avaliação dos dados obtidos bem como a modelagem estão sendo executadas e supervisionadas pela equipe do projeto, que envolve integrantes do INCTAA pertencentes a três unidades da Embrapa (Embrapa Pecuária Sudeste, em São Carlos, SP; Embrapa Milho e Sorgo, Sete Lagoas, MG e Embrapa Algodão, Campina Grande, PB) e a Universidade Federal de Pernambuco (Recife, PE).</p>	
<b>Coordenador:</b>	
Ana Rita de Araujo Nogueira	Embrapa Pecuária Sudeste
Atividade associadas ao projeto: Coordenação e supervisão de atividades de laboratório, coordenação de equipes, revisão de manuscritos, redação de relatórios e contato com os integrantes da equipe do projeto.	
<b>Equipe - Participantes INCTAA:</b>	
Everaldo Paulo de Medeiros	Embrapa Algodão

Atividade associadas ao projeto: Avaliação dos modelos e construção de meios adsorventes	
Fernanda Araujo Honorato	Universidade Federal de Pernambuco, UFPE
Atividade associadas ao projeto: Seleção e disposição física de amostras visando transferência dos modelos desenvolvidos.	
Maria Lucia Ferreira Simeone	Embrapa Milho e Sorgo
Atividade associadas ao projeto: Validação dos modelos e transferência para equipamentos portáteis.	
Gilberto Batista de Souza	Consultor Independente
Atividade associadas ao projeto: Análise estatística dos resultados e avaliação dos modelos propostos.	
Equipe: Participantes externos ao INCTAA	
Ana Carolina de Souza Chagas	Embrapa Pecuária Sudeste
Atividade associadas ao projeto: Supervisão de atividades de manejo animal, definição de planejamento experimental, coleta de amostras, revisão de manuscritos, redação de relatórios e contato com os integrantes da equipe do projeto.	
Avelardo Urano de Carvalho Ferreira	Embrapa Pecuária Sudeste
Atividade associadas ao projeto: Coleta de espectros NIR, treinamento de bolsistas, tratamento de dados, modelagem multivariada para elaboração dos modelos NIRS, escrita de manuscritos.	
Márcio Dias Rabelo	Embrapa Pecuária Sudeste
Atividade associadas ao projeto: Coleta de espectros NIR, coordenação de bolsistas, tratamento de dados, avaliação dos modelos gerados, discussão técnica dos resultados, escrita de manuscritos.	

Sergio Novita Esteves	Embrapa Pecuária Sudeste
<p>Atividade associadas ao projeto: Supervisão dos experimentos de campo e responsável pela sanidade dos animais.</p>	
<p>Ações realizadas dentro da temática do projeto:</p> <p>As atividades realizadas até o momento incluem o monitoramento a cada 21 dias de cerca de 180 ovinos provenientes das raças Santa Inês, Dorper e Texel durante as coletas do 63º (D63) aos 189º dias de vida (D189), totalizando 7 coletas (D63, D84, D105, D126, D147, D168 e D189). Estão sendo medidos os seguintes parâmetros: número de ovos por grama (OPG), ganho médio diário de peso (GMD), volume globular (VG) e grau FAMACHA. Todos os animais receberam tratamento anti-helmíntico no D63 (Ripercol® L - 150F, levamisol 18,8% injetável, 9,4 mg /kg) para estabelecer o início do experimento. Ao mesmo tempo foram realizadas as coletas dos espectros NIR em amostras de 1 mL de sangue inseridas em ampolas de vidro em placas de cultivo de acrílico com 12 poços. Os espectros foram adquiridos em instrumento portátil (Texas Instruments; modelo: NanoNIRS) na região de 900 a 1700 nm e em equipamento de bancada (Büchi; modelo: NIRFLEX N500) na região de 1000 a 2500 nm. Para avaliar a relação entre os espectros NIR e os parâmetros avaliados, foi realizada análise exploratória empregando análise de componentes principais (PCA), regressão pelo método de mínimos quadrados parciais (PLS) para a previsão dos valores de VG e análise discriminante linear (PCA-LDA) como modelo de classificação para diagnóstico (amostras provenientes de ovinos saudáveis e de ovinos doentes).</p> <p>As bolsas DTI-C e ITI-A aprovadas no escopo do projeto foram implementadas em 01/05/2023.</p>	
<p>Atividades que contemplaram a colaboração entre pesquisadores ou grupos do INCTAA (artigos, trabalhos congressos, entre outros):</p> <p>Os membros do INCTAA participantes da proposta possuem histórico de atividade em conjunto, principalmente no escopo de rede NIR da Embrapa, sob a liderança da pesquisadora Maria Lucia Simeone. No escopo desta rede, entre os anos 2014 e 2020, técnicos e pesquisadores da Embrapa usuários da espectroscopia NIR foram capacitados em técnicas quimiométricas; foram construídos modelos de calibração para forrageiras tropicais perenes, milho e solos; desenvolvidos modelos de calibração NIRS para sorgo sacarino (perfil de açúcares) e panicum (composição centesimal), dentre outros; e organizado banco de dados para os modelos de calibração desenvolvidos.</p> <p>Alguns exemplos recentes, associados à temática da atividade em desenvolvimento:</p> <p>Santos, I.B.; <u>Ferreira, A.U.C.</u>; <u>Rabelo, M.D.</u>; Anholeto, L.A.; Sousa, G.A.; Gaínza, Y.A.; Figueiredo, A.; <u>Esteves, S.N.</u>; <u>Chagas, A.C.S.</u> Portable near-infrared</p>	



spectroscopy: A rapid and accurate blood test for diagnosis of *Haemonchus contortus* infection and for targeted selective treatment of sheep,

*International Journal for Parasitology*, 53 (2023) 119-127.

DOI:10.1016/j.ijpara.2022.12.004.

Rabelo, M.D.; Ferreira, A.U.C.; Santos, I.B.; Esteves, S.N.; Chagas, A.C.S. Uso de NIRS portátil para predição de anemia e diagnóstico de ovinos infectados por nematódeos gastrintestinais visando o tratamento seletivo. *Embrapa Pecuária Sudeste, Boletim de Pesquisa e Desenvolvimento*, 56, 2023.

<https://ainfo.cnptia.embrapa.br/digital/bitstream/item/249744/1/BOLETIM-56.pdf>

## APÊNDICE VII

<b>Período: 01/06/2022 a 15/06/2023 (início da atividade: 01/03/2023)</b>	
<b>TEMA DE PESQUISA: Valorização de Produtos Agropecuários</b>	
<p><b>RESUMO:</b> A Embrapa Pecuária Sudeste tem realizado pesquisas visando à otimização do sistema de produção de leite e uma dessas ações visa à obtenção de informações individualizadas, relacionadas à produção, consumo e características sanitárias do rebanho. Vacas de alta produção de leite requerem um rígido controle da alimentação, que inclui ração e sais minerais, pois podem ocorrer doenças metabólicas, como a chamada “doença da vaca gorda”, hipocalcemia puerperal e cetose, que podem causar a morte em função de desbalanço nutricional. Essas doenças podem ser diagnosticadas a partir da coleta de amostras de sangue e, de forma menos invasiva, da saliva das vacas. Esse fluido biológico é constituído por componentes orgânicos e inorgânicos que são potenciais indicadores do estado nutricional e eventual desordem bioquímica. A análise de saliva é estratégica, pela facilidade de obtenção e manipulação, e estudos demonstram que resultados semelhantes foram obtidos em comparação à análise de outros fluidos biológicos como plasma, sangue e soro sanguíneo. Embora os componentes inorgânicos sejam encontrados em baixas concentrações, usualmente inferiores ao determinado no plasma, sua associação com concentrações sanguíneas é relatada na literatura. Como fluido de diagnóstico em humanos, a saliva tem ganhado espaço nas pesquisas translacionais. Trabalhos anteriores do grupo proponente indicaram correlação positiva entre alguns constituintes inorgânicos e o diagnóstico de esquizofrenia, explorando análise de componentes principais (PCA) e mapas auto-organizáveis (SOM), abordagens não supervisionadas capazes de produzir visualizações em baixas dimensões a partir de dados de alta dimensão (J Trace Elem Med Biol, 66(2021)126743). Foi também desenvolvida uma alternativa analítica para a detecção precoce de disfunções renais, via fotometria por imagens digitais (Microchem. J, 162(2021)105862). Este projeto objetiva obter informações importantes relacionadas às características fisiológicas e sanitárias do rebanho, a partir das concentrações de constituintes inorgânicos (ex. Ca, Mg, P, K, Fe, Cu, Mn, Zn, V, Co, Cr, As, Mo, Ni, Se e S), além de alguns marcadores orgânicos em amostras de sangue e especialmente de saliva coletadas das vacas em lactação. O trabalho será conduzido na Embrapa Pecuária Sudeste, sendo as amostras analisadas na Embrapa Pecuária Sudeste, UFSCar, UFPR e CENA/USP. Ferramentas de inteligência artificial baseadas em redes neurais serão aplicadas para discriminar, avaliar e identificar padrões relacionados à composição inorgânica dos fluidos, fatores clínicos e biológicos. Os dados serão analisados pelo grupo colaborador da UFPR e por bolsistas DTI-A.</p>	
<b>Coordenador:</b>	
<b>Ana Rita de Araujo Nogueira</b>	<b>Embrapa Pecuária Sudeste</b>
<p><b>Atividade associadas ao projeto:</b> Coordenação do projeto, supervisão dos experimentos, acompanhamento das coletas de saliva e sangue, estabelecimento dos protocolos de análise por técnicas de plasma (ICP OES e ICP-MS), redação de relatórios e coordenação da equipe do projeto.</p>	

<b>Equipe - Participantes INCTAA:</b>	
<b>Fábio Rodrigo Piovezani Rocha</b>	<b>Universidade de São Paulo – Centro de Energia Nuclear na Agricultura – CENA/USP</b>
<b>Atividade associadas ao projeto:</b> Supervisão das análises de marcadores orgânicos nas amostras de saliva e sangue por técnicas cromatográficas. Proposição de métodos explorando spot tests e fotometria por imagens digitais adquiridas por smartphone.	
<b>Joaquim de Araújo Nóbrega</b>	<b>Universidade Federal de São Carlos - UFSCar</b>
<b>Atividade associadas ao projeto:</b> Discussões técnicas e auxílio nos experimentos relacionados ao preparo das amostras e determinação dos constituintes inorgânicos	
<b>Equipe: Participantes externos ao INCTAA</b>	
<b>Teresa Cristina Alves</b>	<b>Embrapa Pecuária Sudeste</b>
<b>Atividade associadas ao projeto:</b> Pesquisadora (veterinária) responsável pelo manejo das vacas que serão objeto dos experimentos. Responsável pela seleção dos animais, definição das datas e acompanhamento das coletas de saliva e sangue.	
<b>Clarice Dias Britto do Amaral</b>	<b>Universidade Federal do Paraná (UFPR)</b>
<b>Atividade associadas ao projeto:</b> Responsável junto ao restante da equipe pela avaliação dos resultados e supervisão da análise exploratória baseada em inteligência artificial e mapas auto organizáveis.	
<b>Frederico Luis Felipe Soares</b>	<b>Universidade Federal do Paraná (UFPR)</b>
<b>Atividade associadas ao projeto:</b> Responsável pela avaliação dos dados e estabelecimento das ferramentas de inteligência artificial baseadas em redes neurais.	
<b>Ações realizadas dentro da temática do projeto:</b>	
- Por se tratar de experimento com uso de animais foi feita a documentação necessária junto ao Comitê de Ética de Uso de Animais (CEUA) da Embrapa Pecuária	

Sudeste que, por sua vez, a registrou junto ao órgão responsável do Ministério da Agricultura.

- Para a realização das coletas foram selecionadas 50 vacas holandesas e Jersolandas e definidas as datas das coletas.

- As coletas estão em andamento, sendo previstas 3 por animal, as primeiras entre 21 e 14 dias da data prevista para o parto, a segunda no período relativo ao parto e a terceira 10 a 16 dias pós-parto. O número de animais é necessário para a análise estatística. Até o momento foram realizadas coletas nos dias 25/04 (5 animais), 02/05 (6 animais); 09/05 (6 animais); 23/05 (8 animais) e 01/06 (3 animais). Estão previstas coletas até o dia 07/11 e as análises serão iniciadas no mês de julho.

- Foram definidas as condições adequadas para a coleta de saliva (com abridor de boca e seringa, sendo realizadas 2 amostragens por animal, uma para determinação dos constituintes inorgânicos e outra para os marcadores orgânicos). Além da saliva e do sangue, buscou-se também coletar amostras de urina porém, após várias tentativas, descartou-se esta amostragem, que se mostrou muito invasiva e estressante para os animais. Imediatamente após as coletas, as amostras foram congeladas em nitrogênio líquido e trazidas ao laboratório para armazenamento em freezer -80°C.

- Em paralelo, estão sendo coletadas amostras de forragem e concentrado fornecidos aos animais.

- Implementada bolsa DTI-A aprovada no escopo da proposta.

- Solicitação de bolsa de Pós-doutorado complementar, junto ao Edital USP 001/2023

- Bolsas de Pós-Doutorado para Pesquisadoras e Pesquisadores Negros.

#### **Atividades que contemplaram a colaboração entre pesquisadores ou grupos do INCTAA (artigos, trabalhos congressos, entre outros):**

Os membros do INCTAA que integram esta proposta tem um longo histórico de trabalhos em colaboração, tanto na coordenação de grupo de pesquisa (GAIA – Grupo de Análise Instrumental Aplicada, vinculada à Embrapa e UFSCar), quanto em artigos publicados. Alguns exemplos recentes, associados à temática do projeto:

Nóbrega, J.A.; Rocha, F.R.P. Perspective: What constitutes a quality paper in atomic spectrometry. *Talanta Open*, 3(2021) 100045. DOI: 10.1016/j.talo.2021.100045

Marques, T. L.; Nóbrega, J.A.; Rocha, F.R.P. Flow-based solid sample preparation: advantages, limitations, and challenges. *Trac-Trends in Analytical Chemistry*, 118 (2019). 677-685. DOI: 10.1016/j.trac.2019.07.002

Santana, A.; Andrade, D.; Guimarães, T.; Amaral, C.D.B.; Oliveira, A.; Noqueira, A.R.A.; Gonzalez, M.H. Solventes eutéticos naturais profundos (NADES) no preparo de amostras de rocha fosfática e suplemento mineral para determinação elementar

por técnicas de plasma. *Química Nova*, 44 (2021) 689-695. DOI: 10.21577/0100-4042.20170723

Moreira, L.S.; Costa, F.S.; Machado, R. C.; Nogueira, A.R.A.; Gonzalez, M.H.; Silva, E.K.G.P.; Amaral, C.D.B. Self-organizing map applied to the choice of internal standards for the determination of Cd, Pb, Sn, and platinum group elements by inductively coupled plasma mass spectrometry. *Talanta*, 233 (2021) 122534. DOI: 10.1016/j.talanta.2021.122534

Virgílio, A.; Silva, A.B.S.; Nogueira, A.R.A.; Nóbrega, J.A.; Donati, G.L. Calculating limits of detection and defining working ranges for multi-signal calibration methods. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 35 (2020) 1614-1620. DOI: 10.1039/d0ja00212g

Rosa et al., Oral health, organic and inorganic saliva composition of men with Schizophrenia: Case-control study. *Journal of Trace Elements in Medicine and Biology*, 66(2021)126743. DOI: 10.1016/j.jtemp.2021.126743

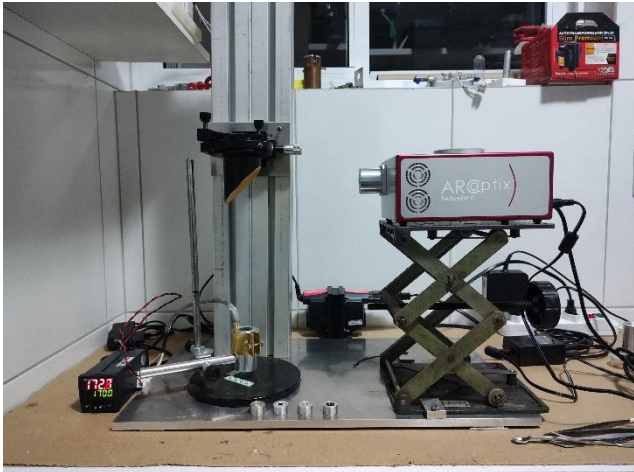
#### **Participação na redação de capítulos do livro:**

Krug, F.J.; Rocha, F. R. P. Métodos de Preparo de Amostras para Análise Elementar. 2a. ed. São Paulo: EditSBQ, 2019.

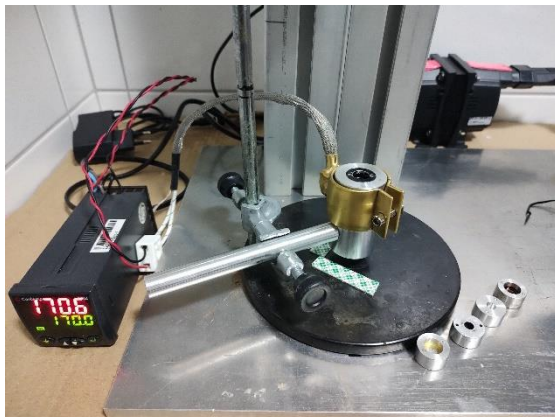
**Trabalho em colaboração** - Projeto Ciências do Mar Meta 1-Segurança Alimentar: Avaliação e monitoramento do impacto da contaminação por HPA, BTX e metais pesados de produtos provenientes da pesca e aquicultura.

**Atividades e resultados que contemplaram colaborações entre INCTs (artigos, trabalhos congressos, entre outros):**

## APÊNDICE VIII

<b>Período:</b> 01/julho/2022 – 30/junho/2023	
<b>TEMA DE PESQUISA:</b> Instrumentação	
<b>RESUMO:</b>	
<p>Dentro deste tema de pesquisa, os pesquisadores do INCTAA desenvolvem atividades em uma das áreas nacionais mais carentes que se refere ao desenvolvimento de instrumentação voltada para a solução de problemas analíticos. A maioria das contribuições resultam da colaboração entre os pesquisadores do INCTAA de diversas instituições de ensino e pesquisa distribuídas pelo país.</p> <p>A maior parte das patentes solicitadas ou obtidas durante todo o período de execução do projeto INCTAA referem-se a contribuições geradas dentro desta temática.</p> <p>No período deste relatório, as atividades e realizações dentro deste tema que foram geradas pelos pesquisadores estão aqui relatadas.</p>	
<b>Coordenador:</b>	
Celio Pasquini	IQ-UNICAMP
<b>Atividades associadas ao projeto:</b>	
<p>Construção e avaliação preliminar de um espectrofotômetro infravermelho (IR) de emissão termicamente induzida baseado em Transformada de Fourier (FT).</p> <p>O espectrofotômetro de emissão IR-FT foi construído com base em um interferômetro produzido pela Arcopitx que opera na região espectral de 2000 a 6000 nm. A foto 1 abaixo mostra a montagem atual do espectrofotômetro.</p>	
	
<p><b>Foto 1:</b> Montagem atual do espectrofotômetro infravermelho de emissão termicamente induzida baseado em transformada de Fourier.</p>	
<p>Nesta versão do espectrofotômetro de emissão IR, um novo sistema de aquecimento mostrado na foto 2 foi construído para permitir um controle melhor da temperatura da amostra e o uso de células de maior dimensão para se obter maior representatividade da amostra investigada.</p>	
<p>Propositalmente, o espectrofotômetro é muito simples, empregando somente um elemento óptico baseado em um espelho parabólico recoberto com filme de ouro</p>	

usado para desviar e focar a radiação emitida pela amostra aquecida na entrada do interferômetro produzido pela Arcopitx.

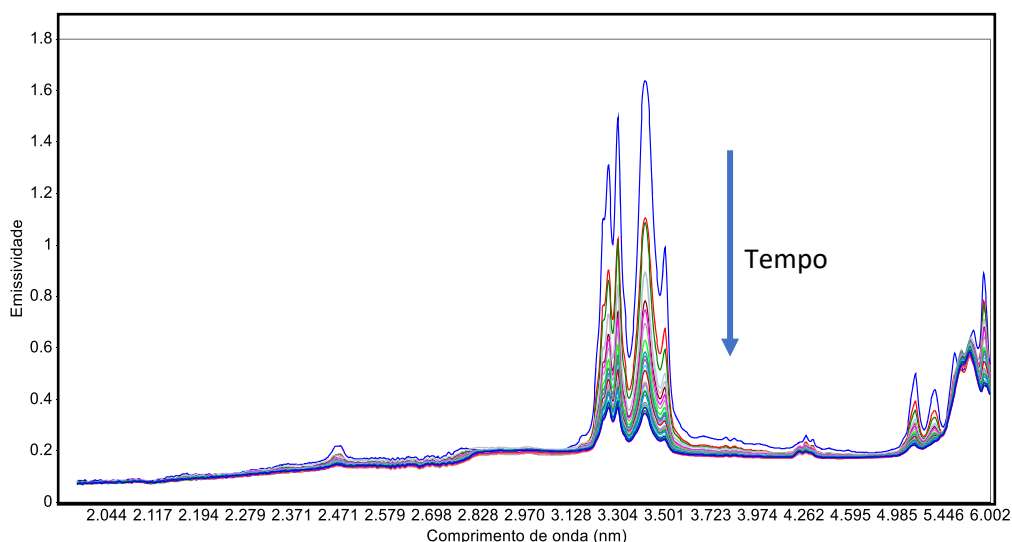


**Foto 2:** Sistema de aquecimento, controle de temperatura da amostra e células de medida para o espectrofotômetro de emissão IR.

Espera-se que, devido a esta simplicidade, possa se estender o uso da espectroscopia de emissão para um número maior de pesquisadores, uma vez que não existem instrumentos comerciais disponíveis.

O espectrofotômetro foi avaliado preliminarmente em estudos de estabilidade térmica de polímeros e de medicamentos, uma vez que este tipo de espectroscopia permite que a composição química da amostra seja monitorada durante o tempo em que ela é submetida ao aquecimento em altas temperaturas. Alterações químicas experimentadas pela amostra são detectadas pela variação do seu espectro de emissão.

A Figura 1 mostra uma coleção de espectros obtidos de uma amostra de poliestireno (PS) aquecido à 170 °C.

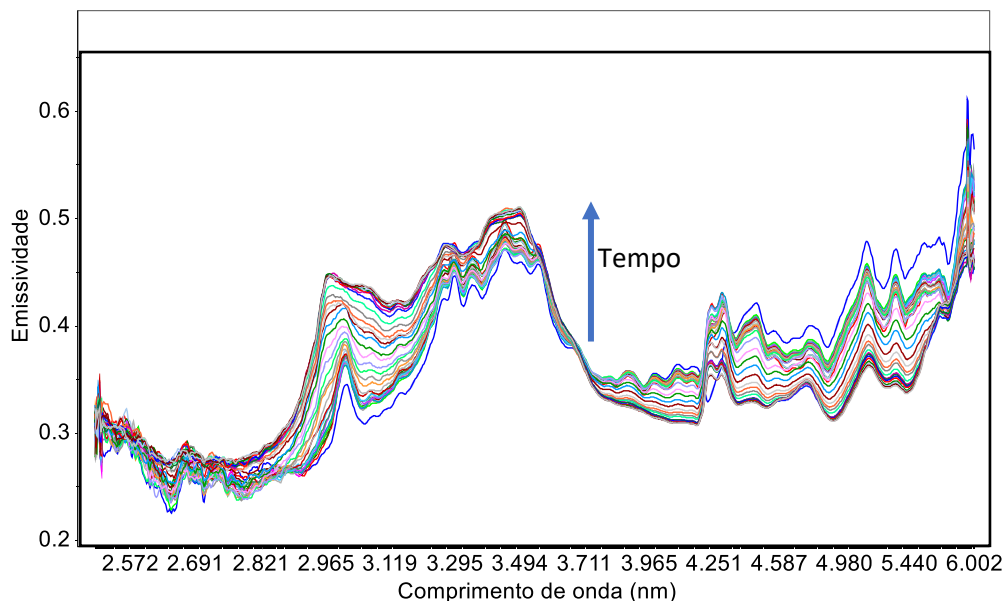


**Figura 1:** Espectros sequenciais obtidos a cada 10 minutos de uma amostra de poliestireno aquecida à 170 °C.



Os resultados mostrados na figura 1 permitem concluir que o poliestireno se decompõe em produtos voláteis e o material remanescente apresenta a mesma composição química da amostra original. Informações sobre a cinética de decomposição do polímero poderão ser extraídos dos resultados obtidos por meio do espectrofotômetro construído.

A Figura 2 mostra a coleção de espectros obtidos a intervalos de 5 minutos de uma amostra do medicamento Novalgina aquecida à 170 °C, cujo ingrediente ativo (IA) é a Dipirona.



**Figura 2:** Espectros de emissão do medicamento Novalgina aquecido a 170 °C.

No caso da Novalgina, observa-se que o medicamento sofre transformações químicas que resultam em produtos não-voláteis de composição diversa da original. As informações obtidas neste tipo de experimento poderão ser empregadas para inferir sobre a estabilidade de medicamentos em experimentos de envelhecimento acelerado.

<b>Participantes INCTAA:</b>	
Jarbas José Rodrigues Rohwedder	UNICAMP
<b>Atividades associadas ao projeto:</b> Construção do espectrofotômetro de emissão e realização dos experimentos de estabilidade térmica de poliestireno.	

<b>Período:</b> 01/julho/2022 – 30/junho/2023
<b>TEMA DE PESQUISA:</b> Instrumentação

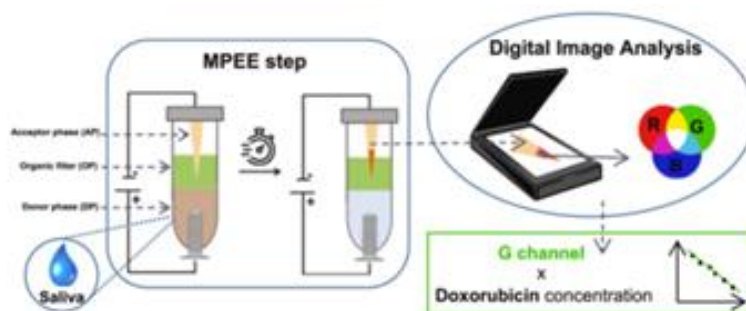
**Coordenador:**

Ricardo Mathias Orlando

UFMG

**Atividades associadas ao projeto:**

Desenvolvimento de sistema simples e rápido de eletro-extração multifase de preparação de amostras para determinação de doxorubicina em saliva.



[Download : Download high-res image \(327KB\)](#)

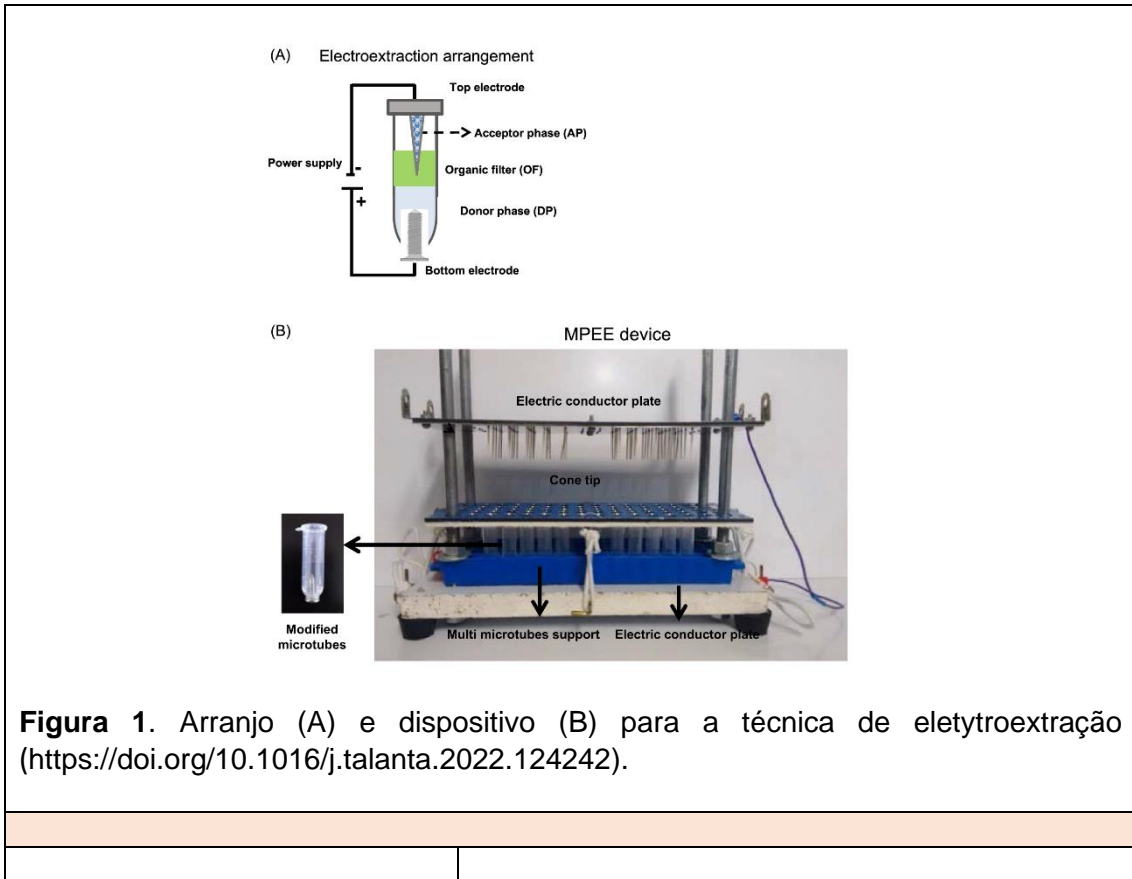
[Download : Download full-size image](#)

Neste trabalho, o sistema de eletro-extração multifase (MPEE) utilizando ponteiras de papel (Figura 1) foi empregado pela primeira vez para extrair e pré-concentrar um quimioterápico (doxorubicina; DOX) da saliva para determinação por análise digital de imagem (DIA). Doxorubicina é um antibiótico antraciclina citotóxico ativo e é usado contra diferentes tipos de câncer, como câncer de mama.

Esta droga é uma base fraca ( $pK_a = 8,94$  e  $9,53$ ), que é ligeiramente lipossolúvel ( $\log P = 1,27$ ), apresenta intensa ligação às proteínas plasmáticas (75-85%) e excreção urinária de cerca de 5,9% [19-21]. Uma vez que trabalhos anteriores relataram graves efeitos tóxicos dessa droga em diversos órgãos como coração, fígado, pulmões, rins e outros órgãos [22,23], o monitoramento da DOX durante terapia em fluidos biológicos é especialmente importante para evitar ou reduzir efeitos colaterais associados ao seu uso.

O desempenho do método MPEE-DIA foi comprovado por figuras de mérito, e sua simplicidade e praticidade foram demonstrados através de sua aplicação em amostras artificiais e amostras de saliva humana.

Este trabalho revelou que o acoplamento da DIA com a eletro-extração constitui uma alternativa vantajosa para o desenvolvimento de métodos analíticos simples e confiáveis para a determinação de drogas em matrizes complexas.



**APÊNDICE IX**

<b>Período:</b> 01/julho/2021 – 30/junho/2022	
<b>TEMA DE PESQUISA:</b> Forense	
<b>RESUMO:</b> <p>Os projetos relacionados a linha de pesquisa visam o desenvolvimento de métodos analíticos voltados para o atendimento da demanda manifestada pelos órgãos de segurança que participam ativamente do INCTAA por meio de pesquisadores peritos criminais da Polícia Federal. No período em avaliação, destacam-se as seguintes atividades recentemente incorporadas ao elenco de ações do INCTAA.</p> <p>Vários estudos propõem o desenvolvimento das ações necessárias para se inserir de forma eficaz as tecnologias analíticas baseadas em espectroscopia infravermelho próximo (NIR) na rotina das atividades analíticas forenses realizadas pelos peritos criminais em laboratório e em campo. Embora um número significativo de trabalhos acadêmicos tenha sido desenvolvido demonstrando o potencial da espectroscopia NIR para a realização de análises forenses, a sua implementação efetiva ainda não foi realizada de forma a poder transformá-la em uma ferramenta de uso rotineiro pelos peritos criminais. Assim, a demanda do setor forense por este tipo de métodos analíticos continua a não ser atendida. Esta linha de pesquisa do INCTAA propõe o desenvolvimento e a adaptação de métodos analíticos baseados em espectroscopia NIR para triagem e caracterização de amostras forenses, especificamente drogas ilícitas, fármacos e agrotóxicos para uso em laboratório e em campo, em operações de investigação e apreensão.</p> <p>O projeto enfatiza o uso de instrumentos NIR de baixo custo e portáteis, prevendo que a disseminação do uso da tecnologia pelos órgãos oficiais se prende também a seus aspectos financeiros, e à implementação de tecnologias baseada em processamento e comunicação remota de informação.</p> <p>A proposta contempla aspectos acadêmicos associados ao desenvolvimento de novos métodos de análise de drogas ilícitas, fármacos e agrotóxicos. Ao mesmo tempo, inclui de forma inédita aspectos práticos relacionados à implementação e uso efetivo dos métodos analíticos baseados em espectroscopia NIR e técnicas multivariadas de classificação e regressão pelos peritos da polícia federal. Para isso, o projeto reúne um grupo de pesquisadores de quatro instituições (UFV, UNICAMP, UFPB e INCPF) com experiência nas áreas necessárias à implementação do projeto e que atuarão de forma sinérgica e complementar para atingir seus objetivos que incluem, além daqueles descritos, a formação de pessoal capacitado para atuar na área da química forense.</p>	
<b>Coordenador:</b>	
<b>Maria do Carmo Hespanhol</b>	<b>Universidade Federal de Viçosa</b>
<b>Atividades associadas ao projeto:</b> <p>Além de coordenar as novas atividades associadas às novas propostas de atuação do INCTAA na linha forense, a Dra. Hespanhol participa do desenvolvimento de</p>	

<p>métodos analíticos baseados em espectroscopia no infravermelho próximo e validação dos equipamentos que serão construídos para possibilitar a ação dos peritos policiais em campo.</p>	
<p><b>Participantes INCTAA:</b></p>	
<p><b>Celio Pasquini</b></p>	<p><b>Instituto de Química - UNICAMP</b></p>
<p><b>Atividades associadas ao projeto:</b></p> <p>Atua no desenvolvimento dos métodos analíticos baseados em espectroscopia infravermelho próximo convencional e com uso de imagens hiperespectrais. No projeto em desenvolvimento será responsável pelo desenvolvimento de métodos analíticos para identificação e quantificação de drogas ilícitas.</p>	
<p style="background-color: #f4b084; height: 15px;"></p>	
<p><b>Adriano Maldaner</b></p>	<p><b>Departamento de Criminalística da Polícia Federal - DF</b></p>
<p><b>Atividades associadas ao projeto:</b> O Dr. Maldaner, perito do Instituto Federal de Criminalística da Polícia Federal – DF, atua na validação dos métodos analíticos forenses desenvolvidos, sugere as características necessárias aos métodos e possibilita o seu uso efetivo pelos peritos daquele órgão agilizando a transferência efetiva do conhecimento gerado pelo INCTAA nessa área de atuação.</p>	
<p style="background-color: #f4b084; height: 15px;"></p>	
<p><b>Jarbas José Rodrigues Rohwedder</b></p>	<p><b>Instituto de Química - UNICAMP</b></p>
<p><b>Atividades associadas ao projeto:</b></p> <p>Desenvolve métodos baseados em espectroscopia infravermelho próximo, Raman e RMN voltados principalmente para a determinação da qualidade de fármacos e insumos farmacêuticos.</p>	
<p style="background-color: #f4b084; height: 15px;"></p>	
<p><b>Mário César Ugulino de Araújo</b></p>	<p><b>Departamento de Química- Universidade Federal da Paraíba</b></p>
<p><b>Atividades associadas ao projeto:</b></p> <p>O Dr. Araújo é responsável pelo desenvolvimento do sistema espectrofotométrico infravermelho para uso em campo pelos peritos criminais atuando em operações de busca e apreensão de drogas e fiscalização.</p>	
<p style="background-color: #f4b084; height: 15px;"></p>	
<p><b>Maria Fernanda Pimentel</b></p>	<p><b>Departamento de Engenharia Química - Universidade Federal de Pernambuco</b></p>
<p><b>Atividades associadas ao projeto:</b></p> <p>Desenvolve atividades de pesquisa relacionadas principalmente à geração de métodos analíticos baseados em espectroscopia infravermelho próximo,</p>	

infravermelho médio e imagens hiperespectrais infravermelho próximo com uso intensivo de técnicas quimiométricas de tratamento de dados.

**Ricardo Honorato**

**Departamento de Criminalística da Polícia Federal – Recife - PE**

**Atividades associadas ao projeto:**

O Dr. Ricardo Honorato é perito da Polícia Federal, pesquisador do INCTAA e colabora com os demais pesquisadores do INCTAA no desenvolvimento dos métodos analíticos, especificando os requisitos necessários para a implementação efetiva dos métodos no dia a dia das atividades policiais.

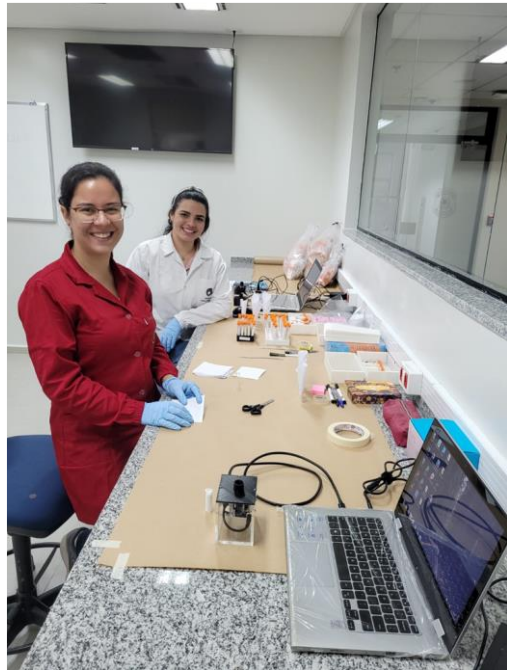
**Atividades que contemplaram a colaboração entre pesquisadores ou grupos do INCTAA (artigos, trabalhos congressos, entre outros):**

Dentre as atividades programadas para o período estavam:




- i) desenvolvimento de um projeto de mestrado no Instituto de Química (IQ) da Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP);
- ii) desenvolvimento de um projeto de doutorado no Departamento de Química (DEQ) da Universidade Federal de Viçosa (UFV);
- iii) intercâmbio da estudante de mestrado IQ/UNICAMP e de doutorado do DEQ/UFV no Instituto Nacional de Criminalística (INC) da Polícia Federal (PF) em Brasília para análise via espectroscopia infravermelho próximo (NIRS) de amostras apreendidas e caracterizadas pela PF;
- iv) Desenvolvimento dos modelos para drogas analisadas;
- v) Finalização da importação dos espectrofotômetros NanoNIR, confecção dos suportes e testes de performance.

Conforme comentado no relatório anterior a maioria das amostras a serem analisadas encontram-se no INC-Brasília e estavam em fase final de caracterização por técnicas do tipo A e B. As amostras definidas para análise foram as amostras de ecstasy e cocaína, pois elas são as mais apreendidas pela PF. As alunas Jamile Souza (UFV) e Jennifer Cavalcante (UNICAMP) se deslocaram até Brasília em maio de 2022 e lá permaneceram por 30 dias (Figura 1). Nas dependências do INC-PF, elas analisaram 1000 amostras de cocaína e 500 de ecstasy em 3 diferentes espectrofotômetros NIR portáteis (Figura 2) com faixa espectral distintas 900 a 1700 nm e 1350-2550 nm. Afim de demonstrar que o equipamento de mais baixo custo com faixa espectral de 900-1700 nm é adequado para analisar as amostras apreendidas pela PF. As alunas tinham um regime de atividades de laboratório, das 08-18 h, que envolvia: a) organização e seleção de amostras dentre as disponíveis no depósito de materiais do Perfil Químico de Drogas da PF, b) registros de

custódia e características físicas das amostras; c) transferência para frascos de vidro apropriados para acondicionamento da amostra; d) obtenção dos espectros NIR em três diferentes espectrofotômetros NIR. Ao final de cada batelada de amostras, todas as amostras eram devolvidas aos seus locais de guarda no depósito da PF; e) os dados espectrais eram transferidos para uma planilha de dados, onde eram adicionadas todas as informações de cada amostra associadas ao respectivo espectro NIR. A partir dessas atividades tivemos como resultados a construção de bancos de dados espectrais robusto de um conjunto de amostras representativas de cocaína e ecstasy para três diferentes espectrofotômetros. Os espectros nos 3 equipamentos foram obtidos para as mesmas amostras e em um período de tempo o mais curto possível para investigar futuramente a transferência de modelos para outros equipamentos, uma vez que serão utilizados equipamentos diferentes pela PF em locais de apreensão distintos.



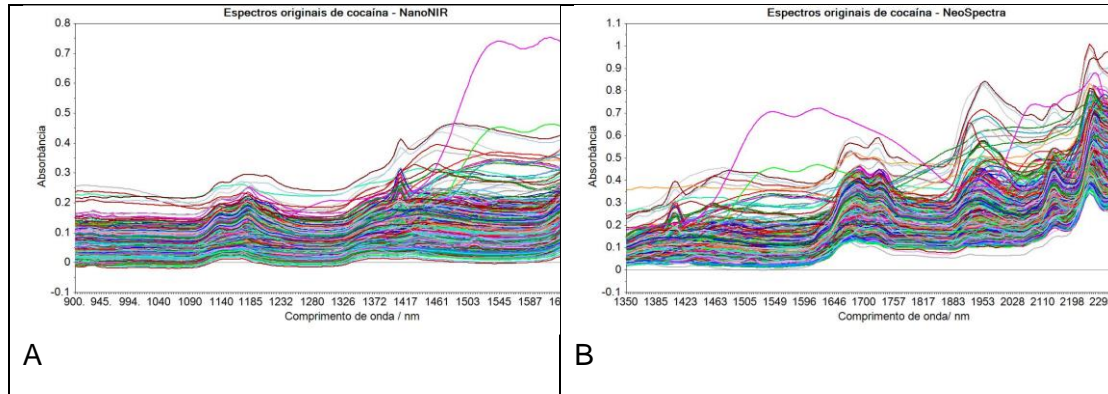
**Figura 1.** Jamille Souza e Jennifer Cavalcante no laboratório do INC-PF

 <p>A 900-1700 nm, Texas</p>	 <p>B 900-1700 nm, Texas</p>	 <p>C 1350-2550 nm, NeoSpectra</p>
---	---	--

**Figura 2.** Espectrofotômetros usados para aquisição dos espectros NIR de 1000 amostras de cocaína e 500 amostras de ecstasy

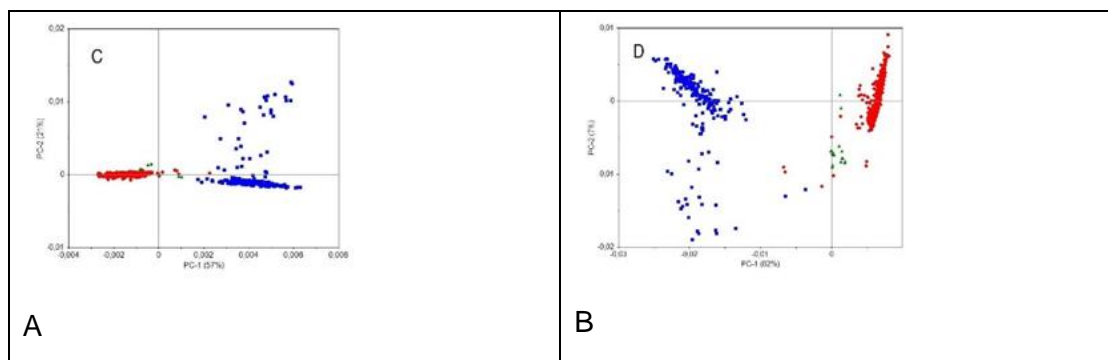


A Figura 3 mostra os espectros NIR de amostras de cocaína apreendidas analisadas pelos espectrofotômetros “A” e “C”, Figura 3A e Figura 3B, respectivamente. Após tratamento quimiométrico observa-se que tanto os espectros obtidos no Texas de menor custo, quanto no Neospectra de maior custo possibilitam distinguir os tipos de cocaína apreendida, ou seja, se é cloridrato de cocaína ou se é cocaína base.



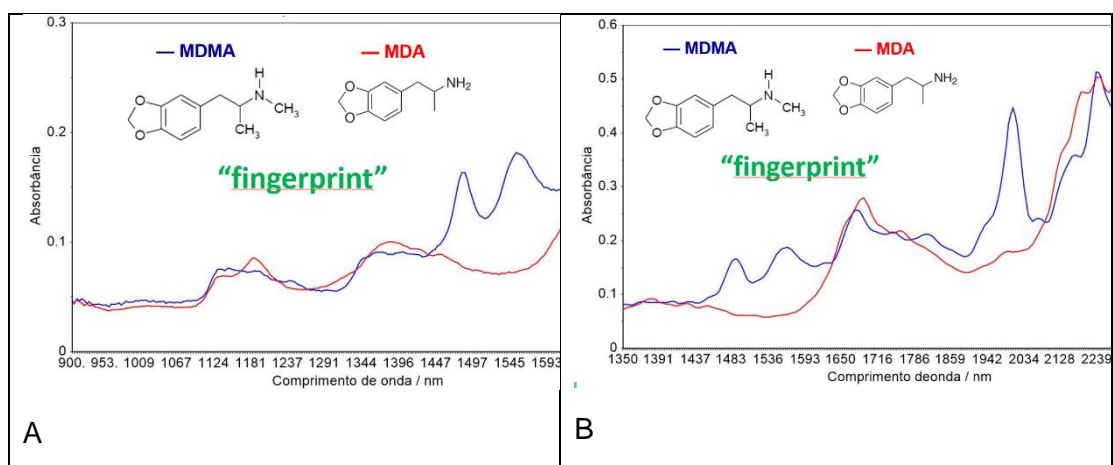
**Figura 3.** Espectros infravermelho próximo obtidos com o auxílio do espectrofotômetro NIR Texas (A) e NIR Neospectra (B).

O conjunto de dados obtido foi pré-processado e tratado no software Unscrambler 11.0 (Aspen Technologies, EUA). Primeiro, os dados foram transformados usando a 2ª derivada (Savitzky-Golay, 11 pontos, polinômio de 2º grau), para minimizar a dispersão e melhorar as características espectrais das amostras. Em seguida, a análise de componentes principais (PCA) foi realizada neste conjunto de dados (Figuras 4A e 4B). Os instrumentos Texas (Figura 4A) e NeoSpectra (Figura 4B) mostram que existem dois grupos distintos com apenas os dois primeiros componentes principais (PC). O componente que melhor distingue entre essas duas formas é o PC1. Assim, é possível utilizar o espectrofotômetro da Texas de menor custo para distinguir a cocaína base livre e do cloridrato de cocaína.



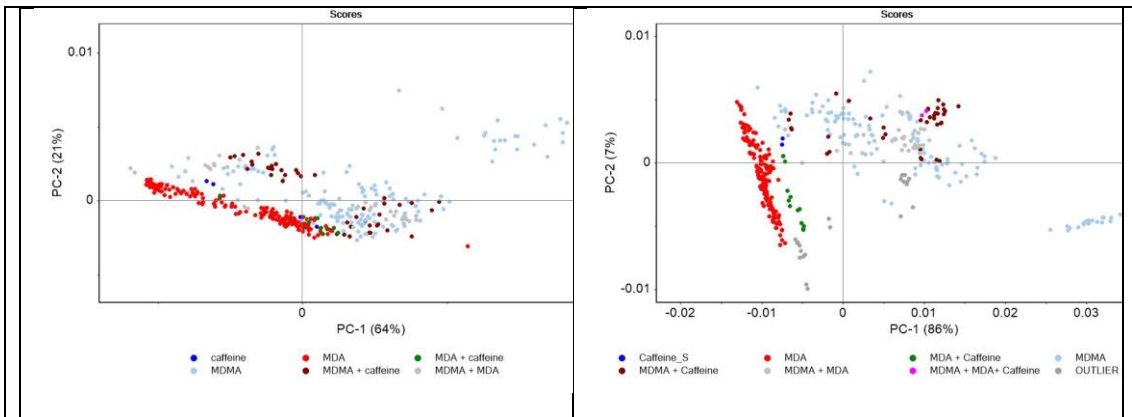
**Figura 4.** Distribuição dos scores de PCA de todos os espectros NIR obtidos. Em azul cocaína base livre e vermelho cloridrato de cocaína.

A Figura 5 mostra os espectros NIR das amostras de ecstasy apreendidas analisadas através dos espectrofotômetros “A” e “C”, Figura 5A e Figura 5B, respectivamente. Observa-se que o espectro NIR obtido para cada um dos equipamentos mostra distingue o 3,4-metilenodioximetanfetamina (MDMA) e do 3,4-metilenodioxianfetamina (MDA) mostrando um “fingerprint” para o tipo de anfetamina. Este resultado é muito promissor, primeiro porque mostra a potencialidade da NIRS classificar diferentes anfetaminas e segundo que o espectrofotômetro de mais baixo custo da Texas, também possibilita esta diferenciação.



**Figura 5.** Espectros infravermelho próximo obtidos através do espectrofotômetro NIR Texas (A) e NIR Neospectra (B).

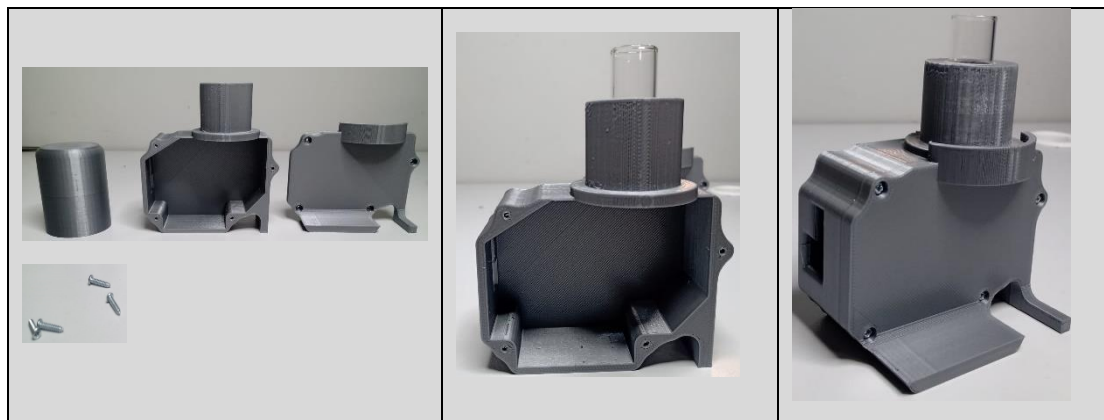
O conjunto de dados obtido foi pré-processado e tratado no software Unscrambler 11.0 (Aspen Technologies, EUA). Primeiro, os dados foram transformados usando a 2ª derivada (Savitzky-Golay, 11 pontos, polinômio de 2º grau), para minimizar a dispersão e melhorar as características espectrais das amostras. Em seguida, a PCA foi realizada no conjunto de dados dos dois instrumentos Texas (Figura 6A) e NeoSpectra (Figura 6B) mostram que existem grupos distintos com apenas os dois primeiros PC. O componente que melhor distingue entre essas duas formas é o PC1.



**Figura 6.** Distribuição dos scores de PCA de todos os espectros NIR obtidos.

Os resultados obtidos demonstraram que a espectroscopia NIR é viável para identificação de para cocaína e ecstasy nas amostras apreendidas. No momento os modelos estão sendo refinados e um novo intercâmbio ao INC-PF-Brasília da estudante de doutorado e do novo pós-doutorando está sendo acertado. O objetivo, nesta etapa, é realizar análises nos dois equipamentos primários (descritos aqui com “A” e “C”, mostrados na Figura 2) de amostras já analisadas e nos três novos equipamentos (secundários) para transferência dos modelos e utilização em campo.

Os três novos espectrofotômetros NIR adquiridos no projeto chegaram em outubro de 2022. Eles foram testados e apresentaram bom desempenho. Devido a diferença de desenho, novos suportes foram confeccionados pelo pós-doutorando Railson Oliveira do grupo da Universidade Federal da Paraíba (UFPB) como mostrado na Figura 7. Estes equipamentos, como mencionado acima, serão utilizados como secundários para treinamento dos peritos e análise em campo, sendo que os modelos serão transferidos para eles em etapa futura.



**Figura 6.** Suporte confeccionado com o auxílio de impressora 3D para os 3 novos espectrofotômetros NIR

No momento a equipe da UFPB está trabalhando no melhoramento software para o sistema autônomo.

Por fim, as estudantes durante o intercâmbio no INC-PF puderam também verificar a potencialidade dos NIRS portáteis para analisar amostras de anabolizantes. Algumas poucas amostras (princípios ativos e amostras reais) de três dos principais anabolizantes aprendidos pela PF em operações de tráfico de comprimidos (stanozolol, metandrostenolona e oxandrolona) foram analisadas. Os resultados iniciais para foram animadores, indicando a possível aplicação da NIRS para análise de anabolizantes em etapas futuras mais amostras serão analisadas.

**Atividades e resultados que contemplaram colaborações entre INCTs (artigos, trabalhos congressos, entre outros):**

Nada consta no período.