









INSTITUTOS NACIONAIS DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA – INCT ACOMPANHAMENTO E AVALIAÇÃO

Período de abrangência do relatório: 01/JULHO/2017 - 30/JUNHO/2018

IDENTIFICAÇÃO DO PROJETO

TÍTULO: Instituto Nacional de Ciências e Tecnologias Analíticas Avançadas –

INCTAA – Fase II

PROCESSO Nº: FAPESP: 2014/50951-4 CNPq: 465768/2014-8

COORDENADOR: Celio Pasquini

PROJETO DE PESQUISA

HOUVE ALTERAÇÕES NOS OBJETIVOS E/OU METAS PROPOSTOS? (X)SIM ()NÃO

Neste período inicial da Fase II do Instituto Nacional de Ciências e Tecnologias Avançadas as ações se concentraram na redefinição do seu orçamento e das atividades de pesquisa, ensino e extensão em vista dos cortes orçamentários sofridos em relação à proposta inicial apresentada à FAPESP e ao CNPq. Os objetivos e metas previamente propostos foram mantidos em seu escopo geral. Porém, houve, diante da redução significativa de recursos, uma readequação de orçamento e de objetivos específicos e suas metas em curto prazo (1º. ano e parte do 2º. ano).

Estas decisões foram tomadas após a realização de um Workshop que reuniu parte dos pesquisadores do INCTAA em Brasília – DF em novembro de 2017. Infelizmente, desta vez, devido aos cortes orçamentários, nem todos os pesquisadores do INCTAA puderam ser convidados a participar do workshop. Assim, somente 36 pesquisadores, representantes de grupos e de temas de pesquisa abordados pelo INCTAA, foram convidados e participaram deste evento.

Sob o ponto de vista orçamentário, o Comitê Gestor do INCTAA decidiu readequar, em relação à proposta original, a destinação de recursos de custeio privilegiando no momento atual a manutenção das atividades em andamento e alocando recursos de para aquisição somente de novos equipamentos considerados imprescindíveis ao andamento do projeto.

Considerando a manutenção das atividades, o Comitê Gestor e os participantes do workshop em Brasília compreenderam que os recursos existentes deveriam privilegiar o intercâmbio de alunos e pesquisadores em missões de trabalho associadas aos projetos.

O evento foi bastante produtivo e gerou rapidamente a definição de projetos com objetivos viáveis de serem atingidos com os recursos efetivamente aprovados pelas agências de financiamento, FAPESP e CNPq. Estes projetos foram submetidos ao Comitê Gestor do INCTAA que os avaliou dentro da missão do instituto e seus objetivos gerais, tendo destinados a eles recursos capazes de iniciar ou manter as atividades necessárias à sua execução.











Os projetos aprovados que tiveram seu início no período referente a este relatório, associados às diversas vertentes de ação do INCTAA, seu desenvolvimento atual e resultados no período são descritos a seguir.

I. TEMA DE PESQUISA INCTAA: QUÍMICA AMBIENTAL

Este é um dos temas principais de atuação do INCTAA. Nesta fase do projeto o grupo de pesquisadores que nele atuam definiram as seguintes ações que coadunam com problemas detectados nesta área que requerem abordagem analítica moderna para a obtenção de resultados de relevância para a preservação do meio ambiente, especialmente no que se refere aos recursos hídricos e seu reaproveitamento.

I.1. ESTAÇÃO PILOTO DA ESTAÇÃO PRODUTORA DE ÁGUA DE REUSO (EPAR-CAPIVARI II)

O objetivo desta proposta é centrado no desenvolvimento de pesquisas no intuito de avaliar a qualidade do efluente tratado com a tecnologia de Biorreatores de Membranas de Ultrafiltração (MBR) na Estação EPAR-Capivari II, que atende a uma população de 175.000 habitantes, operando com uma vazão média diária de 300 L/s. Tal avaliação visa verificar a potencialidade de se empregar o efluente tratado como água de reuso, para fins não potáveis o que indubitavelmente é de grande relevância considerando as crises hídricas que o Estado de São Paulo tem enfrentado nos últimos anos. Não menos importante é a consideração de que o efluente tratado por essa tecnologia irá impactar com menor intensidade o corpo receptor minimizando os efeitos deletérios do lançamento, com relação à qualidade da vida aquática e saúde pública. Adicionalmente, o reuso do efluente tratado para fins não potáveis, poderia atender a diferentes finalidades, tais como: urbanos (irrigação paisagística, lavagem de logradouros públicos e veículos, desobstrução de tubulações, construção civil, edificações, combate a incêndio), produção agrícola e florestais, industriais e aquicultura (criação de animais ou cultivo de vegetais aquáticos), mediantes avaliações específicas, tanto do ponto de vista químico quanto ecotoxicológico.

Durante o período referente a este relatório, foram iniciadas discussões entre os participantes para estabelecer a forma de conduzir os trabalhos em rede. Em dezembro, foi realizada uma visita ao CIRRA, na Escola Politécnica da USP, para convidar o Professor José Carlos Mierzwa a integrar a equipe, colaborando não apenas, mas principalmente nos aspectos relacionados aos parâmetros de engenharia aplicados à operação da planta piloto de reuso, no que fomos atendidos, com a sinalização de uma possível colaboração profícua, onde o grupo do INCTAA, buscaria atender à principal demanda atual da SANASA nesta estação, que é referente à adequada realização de análises químicas e biológicas, tais como: determinações de contaminantes emergentes, vírus, N-nitrosodimetilamina, condução de testes de mutagenicidade, toxicidade aguda e crônica e testes para hormônios, tópicos nos quais os pesquisadores desta rede têm a expertise necessária e infraestrutura adequada para conduzir os trabalhos.

Foi também realizado um levantamento dos contaminantes de preocupação emergente com os quais os pesquisadores do grupo estão trabalhando, a fim de elencar compostos de interesse em comum e que possam ser monitorados no ambiente pela rede. Ao total são 139 contaminantes de preocupação emergente, abrangendo desde compostos em produtos de higiene pessoal (cinza e verde), fármacos de uso humano e veterinário (vermelho) e agrotóxicos (azul) (Figura 1). Esses compostos foram priorizados previamente em cada grupo de pesquisa.











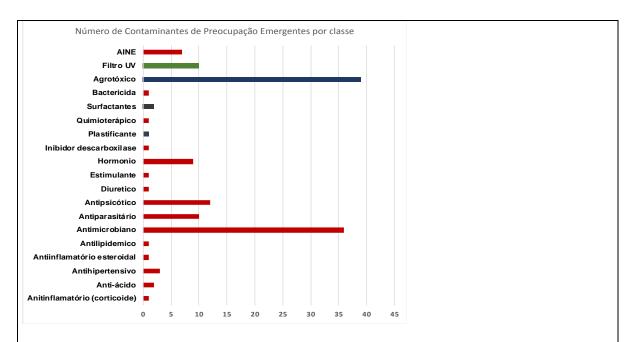


Figura 1. Número de contaminantes de preocupação emergente (separados por finalidade de uso) nos grupos de pesquisa.

I.2. DIAGNOSTICAR A INFLUÊNCIA DE FONTES INDUSTRIAIS NA CONTAMINAÇÃO DE ÁGUAS POR FÁRMACOS NO BRASIL

Esta ação do INCTAA e seu Grupo de Química Ambiental busca diagnosticar a influência de fontes industriais na contaminação de águas por fármacos no Brasil. Seu trabalho envolverá o estudo das águas do Distrito Agro-Industrial de Goiás (DAIA), em Anápolis-GO, o segundo maior polo farmoquímico do Brasil, sendo o DAIA consolidado como o maior pólo farmacêutico de genéricos da América Latina. Vários padrões analíticos regulares e deuterados já foram adquiridos, tais como ibuprofeno, ibuprofeno-d3, acetaminofeno, acetaminofeno-d4, cafeína, cafeína-d9, naproxeno, carbamazepina, bupropiona, ácido mefenâmico, dapsona, gemfibrozil, sulfametoxazol, nortriptilina, atenolol, amitriptilina, venlafaxina, diclofenaco sódico, hidroclorotiazida, ciprofloxacina, cefalexina, bezafibrato, amoxicilina, eritromicina e ácido clofíbrico. Outras substâncias deuteradas ainda não foram adquiridas, mas encontram-se em fase de cotação.

Neste momento, parâmetros de aquisição em equipamento LC-MS/MS, tais como fonte de ionização *eletrospray*, seleção de íons precursores e produtos, otimização de energias de colisão e transmissão de íons, entre outros estão sob investigação.

I.3. ESTIMATIVA DO CONSUMO DE COCAÍNA E OUTRAS DROGAS ILÍCITAS EM CIDADES BRASILEIRAS POR MEIO DA ANÁLISE DE ÁGUAS RESIDUÁRIAS

Devido ao uso nas sociedades urbanas, drogas ilícitas têm sido encontradas em águas residuárias o que tem permitido estimar seu consumo de modo empírico em tempo real. Esta estratégia, denominada WBE (Wastewater Based Epidemiology), permitiu, com apoio do INCTAA, mapear o consumo de cocaína no Distrito Federal (DOI: 10.1590/S0103-50532012000500011 e 10.21577/0103-5053.20170063) e estabelecer estratégias de preservação de amostras (Drug Test. Anal.: under review) de modo a ampliar o mapa de consumo pelo Brasil. Ao contar novamente com o INCTAA, esta proposta busca levar a WBE para outras regiões, expandindo a estimativa do consumo de drogas para um ambiente nacional, fortalecendo o funcionamento em rede do INCTAA. Etapas realizadas











Atualmente, há dois estudantes envolvidos a epidemiologia de esgoto. A estudante Katyeny Manuela da Silva defenderá sua dissertação de mestrado em agosto 2018 e o estudante Diogo de Jesus Soares Freire ingressou do mestrado no início do ano e, consequentemente, será responsável por executar as análises inerentes ao presente projeto de pesquisa. O estudante Diogo finalizou treinamento em equipamento LC-MS/MS alocado na Faculdade de Tecnologia da UnB (Sciex 3200 acoplado a HPLC com injeção manual) e já se encontra apto a operar equipamento alocado no Instituto Nacional de Criminalística da Polícia Federal (Sciex 3200 acoplado a UPLC Agilent 1290), destinado a receber e analisar as amostras do presente projeto.

Está em fase de elaboração uma carta-convite a ser enviada para todos os membros do INCTAA de modo que seja possível construir a rede de monitoramento. Ao aceitar o convite, pesquisadores e suas equipes deverão gerenciar coletas, enviar amostras para o Distrito Federal e compilar dados essenciais para a implantação WBE, tais como índice de tratamento de esgoto, população atendida pelas estações de tratamento e vazão afluente do esgoto. A carta-convite está sendo elaborada de maneira que respostas subjetivas sejam evitadas favorecendo respostas assertivas e pautadas em dados numéricos e em informações passíveis de rastreamento, tais como localização de estações de tratamento de esgoto, anuência formal da concessionária de esgoto em fornecer acesso as suas dependências, amostras compostas e acumuladas (24 h) e dados sobre a vazão afluente do esgoto. Considerando que estas informações são essenciais, também preparamos uma carta de intenções a ser utilizada pelo pesquisador para estabelecer parceria com a concessionária de esgoto de sua cidade.

I.4. NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS E NANOFIBRAS POLIMÉRICAS PARA A EXTRAÇÃO/PRÉ-CONCENTRAÇÃO/REMOÇÃO DE CONTAMINANTES EMERGENTES DE ÁGUAS.

A presente ação visa sintetizar e estudar nanopartículas magnéticas funcionalizadas e nanofibras poliméricas para a extração/pré-concentração ou remoção de contaminantes emergentes de águas, transcorre dentro do cronograma, como previsto.

Nanopartículas magnéticas

Sucintamente, o trabalho envolve as etapas de i) síntese das nanopartículas magnéticas, ii) funcionalização destas nanopartículas e iii) testes de adsorção/remoção/préconcentração em amostras de águas. Atualmente, o projeto encontra-se no início da etapa ii, salientando que serão inclusos mais dois agentes funcionalizantes além daquele descrito no projeto original, ou seja, a pesquisa que seria realizada somente com o nhexadeciltrimetoxissilano, será conduzida também com o perfluorooctiltrietoxissilano e o viniltrietoxissilano, variando-se a proporção entre os três agentes.

A rota de síntese empregada até o momento é capaz de produzir com sucesso as partículas funcionalizadas. No entanto, esforços estão sendo despendidos para tornar a síntese mais direta e simples de ser executada. Nesse sentido, estão sendo investigados solventes menos nocivos e de menor custo, bem como a redução do número de etapas como as de lavagem do material e de trocas de solvente.

Nanofibras poliméricas

Até o momento, foram sintetizadas as nanofibras de poliamida-6,poli(E- caprolactona), poli (ácido láctico) e poli (butilenoadipato co-tereftalato) por eletrofiação. O processo de montagem do equipamento de eletrofiação encontra-se na fase inicial da realização do











orçamento para aquisição das peças necessárias.

II. TEMA DE PESQUISA INCTAA: INSTRUMENTAÇÃO ANALÍTICA

II.1. CONSTRUÇÃO DE UM ESPECTROFOTÔMETRO RAMAN PARA OPERAR NA REGIÃO DE BAIXAS FREQUÊNCIAS

O espectrômetro Raman será inicialmente aplicado para medidas espectroscópicas de amostras sólidas. No entanto, por ser um instrumento construído no laboratório terá a característica de maior flexibilidade para realização de experimentos diversos, com possibilidades de medidas micro e macro de amostras sólidas, mapeamento e imagem, medidas em baixas temperaturas (sistema criogênico: temp. de até 7 K). Análise de amostras líquidas por meio de cubetas, reatores e amostras gasosas pelo uso de cela de gás ou guias de onda.

Além das amplas aplicações que a espectroscopia Raman clássica proporciona (região espectral de 200 a 2200 cm⁻¹) esse espectrômetro também terá a capacidade de adquirir espectros na região das baixas frequências vibracionais (10 – 200 cm⁻¹; 0.3 – 6 THz) (*low frequency Raman*) devido ao uso de uma nova tecnologia de filtros notch com largura de banda ultra fina. Essa região espectral apresenta bandas referentes às vibrações dos modos fônons de cristais, das vibrações das ligações intermoleculares tais como as ligações de hidrogênio e interações de van-der-Waals, tanto em líquidos como em sólidos, bem como o espectro rotacional de gases.

Devido à sensibilidade que a região espectral das baixas frequências possui para diferentes sistemas cristalinos, suas aplicações também são amplas como no estudo de:

- Polimorfismo
- Crescimento de cristais
- Transformações de fase sólido-sólido
- Cristalinidade
- Drogas
- Explosivos
- Mineralogia
- Forense
- Química Ambiental

Foi optado por construir o espectrômetro Raman, e não adquirir um instrumento comercial, pois o projeto proposto para o espectrômetro apresenta algumas caraterísticas especiais necessárias, que juntas não são encontradas em nenhum instrumento comercial. Dentre essas caraterísticas estão a aquisição de espectros na região de baixas frequências vibracionais como já dito anteriormente, bem como a variação do ponto iluminado pelo LASER na amostra.

O sistema instrumental projetado é dividido em módulos. O primeiro deles é o sistema que compõe o Laser de excitação, porta amostra e os filtros Raman, como mostrado na Figura 2a. O Laser emite no comprimento de onda de 785 nm. Para atender as características especiais do instrumento o LASER deve apresentar duas características importantes que são a alta potência e banda espectral ultra fina (< 1 GHz; single mode). A potência precisa ser alta, pois uma vez que o feixe do Laser será expandido para iluminar uma grande região da amostra (até 3 mm de diâmetro), é importante que a potência por área iluminada não decresça muito ao ponto de não ser observado o espalhamento Raman.











Antes de ser conduzido para a amostra, a radiação do Laser é submetida à uma filtragem da Emissão espontânea amplificada (ASE - *Amplified Spontaneous Emission*) que consiste de bloquear a emissão que ocorre em comprimentos de onda muito próximos ao do Laser e que podem encobrir o espalhamento Raman na região das baixas frequências vibracionais.

A radiação do laser, depois de filtrada, é incidida na amostra através de uma lente asférica e a radiação retro-espalhada (espalhamento da luz à 180°) é coletada e conduzida para os filtros *notch* que têm o papel de bloquear o espalhamento Rayleigh, para que assim somente o espalhamento Raman seja detectado. Esses filtros *notch* também possuem uma característica especial que de possuir uma banda de bloqueio ultrafina para filtrar somente o comprimento de onda do Laser (espalhamento elástico ou Rayleigh).

O próximo módulo consiste do espectrômetro contendo o monocromador e a câmera CCD para a detecção do espectro. A radiação, depois que passa pelos filtros *notch*, é coletada por uma fibra óptica que a conduz para dentro do monocromador para ser detectado pela câmera CCD (Figura 2b).

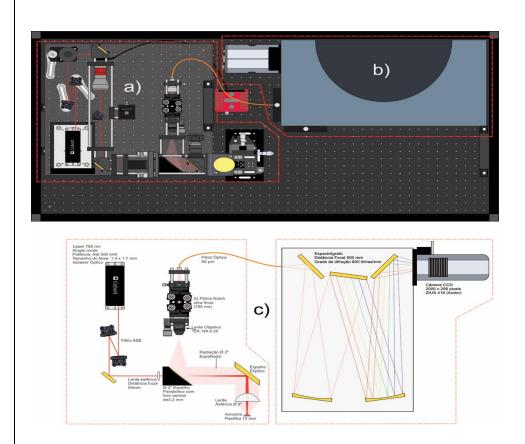


Figura 2. Desenho do espectrômetro Raman. a) Sistema óptico de excitação por Laser da amostra para geração do espalhamento Raman. b) Espectrômetro + Câmera CCD para detecção do espectro de espalhamento Raman. c) Esquema contendo os principais dispositivos ópticos do espectrômetro Raman.

Essa característica de ser um espectrômetro modulado, permite que o monocromador junto com a câmera CCD sejam utilizados para outros fins. Portanto, aplicações que envolvam fotoluminescência, fluorescência e luminescência que estejam compreendidas na faixa espectral de 200 a 950 nm, também podem serem contempladas. O sistema











instrumental aqui descrito, não contêm fontes de radiação para as finalidades de luminescência e fluorescência. Uma montagem externa é necessária. Atualmente este sistema, que já está em funcionamento no Laboratório, está sendo utilizado para medidas de emissão de fluorescência. Um desenho esquemático do projeto do instrumento é mostrado na Figura 2. Na Tabela 1 são mostradas as especificações do instrumento. Na Figura 3 é mostrado uma foto do estado atual da montagem do sistema proposto.

Além disso, por se tratar de um espectrômetro montado modularmente, modificações podem serem realizadas para aplicação da espectroscopia LIBS com os ajustes necessários da técnica uma vez que o GIA já possui bastante experiência nessa técnica instrumental. A câmera CCD que será usada neste sistema possui alta eficiência quântica e, portanto, é muito sensível às aplicações empregando LIBS. O monocromador permite utilizar 3 grades de difração simultaneamente o que nos dá a possibilidade de explorar diferentes regiões e resoluções espectrais.

Tabela 1. Especificações do instrumento.

Laser				
Comprimento de onda	785 nm			
Potência máxima	500 mW			
Controle da potência	Por meio de software			
Modo	Single Mode			
Forma do feixe	Elíptico (1.7 mm x 1.4 mm)			
Compartimento de amostra				
Sólidos	180° Retro-espalhamento (Backscattering) Imagem ou espectroscópico			
Líquido	Cubetas de diversos tamanhos			
Gases	Cela de gases; Guia de onda			
Radiação incidente	Por meio de lentes ou Laser direto			
Espectrômetro				
Distância focal do monocromador Czerny- Turner	500 mm			
Faixa espectral para o Raman (Filtros notch de banda ultra fina)	10 a 2200 cm ⁻¹ (Stokes) -10 a -2200 cm ⁻¹ (Anti Stokes) evita fluorescência			
Faixa espectral para Luminescência/Fluorescência	400 – 950 nm			
Entradas do monocromador	Fibra óptica e Fenda			
Grades de difração				
600 l/mm (Raman)				
Máxima Resolução	1.8 cm ⁻¹ / 0.12 nm			
Blaze	750 nm			
Detector (Câmera CCD)				
Sensor	2000 x 256 pixel			













Figura 3: Foto do instrumento em seu estágio atual da montagem do espectrômetro Raman.

III. TEMA DE PESQUISA INCTAA: **DESENVOLVIMENTO DE MÉTODOS ANALÍTICOS**

III.1. DESENVOLVIMENTO DE MÉTODOS ANALÍTICOS SENSÍVEIS BASEADOS EM NANOPARTÍCULAS COM APLICAÇÕES EM QUÍMICA AMBIENTAL.

As nanopartículas coloidais, como os semicondutores nanocristalinos com excesso de vacâncias, pontos quânticos (PQs) do tipo-p são materiais interessantes para aplicações SEIRA (Espectroscopia de absorção no infravermelho intensificada por superfície), uma vez que essas nanoestruturas semicondutoras devem exibir ressonâncias plasmônicas de superfície localizadas, do inglês localized surface plasmon resonances (LSPRs) com tamanho e forma semelhante aos metais. A preparação dos filmes metálicos finos ativos, com intensificação significativa, caracteriza-se como uma etapa crítica e desafiadora de um experimento SEIRA bem-sucedido. No presente projeto, tem se investigado conjuntamente o efeito dos parâmetros envolvidos na síntese desses PQs (sulfetos de cobre), tais como: (i) temperatura, (ii) pH, (iii) atmosfera e (iv) razão precursor/estabilizante. Para tanto, inicialmente, foi realizado um planejamento fracionário 2_III^(5-2) (Tabela 1) para avaliar a formação do PQs de cobre.

Tabela 1. Planejamento fracionário

Ensaios	Temperatura	рН	Atmosfera	Cu:MSA	Cu: S
3	25	10	Não Inerte	1:2	1:1
7	25	10	Inerte	1:2	1:2
2	90	5	Não Inerte	1:2	1:1
5	25	5	Inerte	1:6	1:2
6	90	5	Inerte	1:2	1:2
8	90	10	Inerte	1:6	1:2
4	90	10	Não Inerte	1:6	1:1
1	25	5	Não Inerte	1:6	1:1











Com base nos resultados obtidos até o momento, verificou-se que temperatura e pH são fatores significativos em relação ao excesso de vacâncias e tamanho de partículas. Algumas condições de síntese produziram algumas partículas com baixa estabilidade (devido ao alto índice de aglomeração) e, consequentemente, isso dificultaria sua aplicação no futuro. Para contornar a aglomeração entre as partículas, as amostras foram sonicadas após o término de cada síntese, o que diminuiu significativamente o grau de aglomeração. Além disso, resultados semelhantes à sonicação foram obtidos com a diluição de algumas amostras. Por fim, a quantidade de material produzido é pequena, sendo necessário reproduzir entre 2 e 3 sínteses para se obter material suficiente para as demais caracterizações (DRX, FT-IR, por exemplo).

As próximas atividades dessa atividade do projeto serão: caracterizar morfologicamente o material desenvolvido; combinar os PQs com a tecnologia de impressão molecular; avaliar as propriedades e o efeito sobre a amplificação do sinal analítico; aplicar analiticamente os materiais obtidos.

Outra atividade em desenvolvimento dentro desta ação, consiste na formação de sistemas de associação entre Metal-Organic Frameworks (MOFs) e óxido de grafeno (GO) como materiais adsorvedores de metais pesados. As nanopartículas de GO foram sintetizadas utilizando-se o método Hummers, com algumas modificações, e, posteriormente, caracterizadas. Os híbridos desenvolvidos foram baseados nas redes de coordenação HKUST-1 e ZIF-8, e folhas de GO, utilizando método solvotérmico. Os compósitos MOF/GO foram preparados dispersando-se o pó de GO (para HKUST-1) em solução do ligante H3BTC e na solução do metal Zn2+ (para ZIF-8). As propriedades morfológicas e estruturais foram investigadas. O difratograma de raios X (DRX) de pó das nanopartículas de carbono forneceu a prova conclusiva da obtenção das folhas de GO, uma vez que o único pico de difração apareceu em 2θ = 10,78, indicando que o produto foi completamente oxidado. Os compostos HKUST/GO mantiveram a cristalinidade e estrutura da HKUST-1 individual, tal fato foi verificado tanto pelos difratogramas de DRX, quanto pelo espectro de absorção na região do infravermelho (FTIR), respectivamente. Na espectroscopia de Raman, foi possível observar que, ao aumentar a quantidade de GO na síntese da HKUST-1, apareceram bandas em 1335 cm-1 e 1580 cm-1 atribuídas aos defeitos sp3 dentro da estrutura grafítica e a materiais de carbono híbrido sp2, respectivamente, o que mostrou o sucesso das sínteses em integrar a HKUST-1 com as folhas de GO. Com as imagens de microscopia eletrônica de varredura (MEV) foi possível observar uma mudança considerável na superfície dos cristais de HKUST-1 com o aparecimento de folhas, evidenciando a presença de GO. Para os compósitos ZIF-8/GO, observou-se também a preservação da estrutura cristalina da ZIF-8, bem como verificouse por Raman e MEV, a presença do material grafítico. Esse comportamento reforça, portanto, a hipótese de que essa metodologia de integrar GO com dois tipos de MOFs foi bem-sucedida e, que, esses materiais são candidatos interessantes para a utilização na remoção de metais pesados. Nesse sentido, os ensaios de remoção dos íons Cd, Pb, Ar e Ba a partir dos sistemas acima descritos já estão sendo planejados.

III.2. ANÁLISE DE POLIMORFOS HIDRATADOS DE FÁRMACOS POR ESPECTROSCOPIA TERAHERTZ.

Praticamente todos os produtos farmacêuticos sólidos apresentam mais de uma fase sólida definida pelo fenômeno de polimorfismo, dentre elas estima-se que um terço possa formar hidratos onde a molécula de água compõe a estrutura cristalina. A fase hidratada de um fármaco comumente pode ser formada pelo simples equilíbrio químico com a umidade relativa do ambiente, mas também pode ser induzida durante as operações unitárias do processo industrial farmacêutico, como os processos de moagem, granulação úmida, suspensões entre outros.









O controle de qualidade de produtos farmacêuticos quanto as suas formas polimórficas é de suma importância, pois diferentes fases sólidas possuem diferentes propriedades físico-químicas que interferem na dissolução do fármaco e portanto sua biodisponibilidade. Também interfere na compressão dos comprimidos uma vez que a fase hidratada normalmente possui uma menor densidade dada pelos espaços criados pela presença da água na célula unitária.

Os polimorfos hidratados de fármacos, algumas vezes chamados de pseudo-polimorfos, são divididos em três categorias1: (1) os hidratos onde as moléculas de água não se conectam uma com as outras ou seja, são isoladas pelas moléculas do fármaco; (2) os hidratos onde as moléculas de água se conectam, via ligações de hidrogênio, umas com as outras formado canais de água ao longo do cristal. Neste caso existem três subclassificações de hidratos do tipo canal que são as estruturas apresentam canais composto por uma fileira de moléculas de água, outra onde o canal é formado por mais de uma fileira de moléculas de água e por último outra onde é formado um canal planar entre dois planos de fármacos; (3) Os hidratos formados pela interação íon metal coordenada com a água.

Dentre os fármacos que possuem formas polimorfos hidratadas existem a Teofilina e a Cafeína. A suas fórmulas químicas são mostradas na Figura 4. Ambos os fármacos formam hidratos do tipo canais como pode ser visto nas Figuras 5a e 5b.

Figura 4: Estrutura química da (a) teofilina e da (b) cafeína.

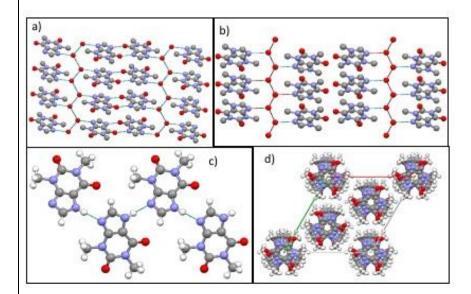


Figura 5. Estrutura cristalina dos polimorfos da Teofilina (a) monohidratada e (c) anidra e











da Cafeína (b) hidratada e (d) anidra. Nas figuras a e b os átomos de hidrogênio foram suprimidos para uma melhor compreensão da estrutura.

Os polimorfos hidratados do tipo canal podem perder a molécula de água com mais facilidade do que um polimorfo hidratado do tipo isolado, pois os canais são os caminhos de saída da água na desidratação. Por esses motivos, os polimorfos hidratados do tipo isolados apresentam bandas estreitas nos eventos de perda de água nas análises térmicas (DSC a TGA) assim como uma banda estreita referente ao estiramento OH no espectro de infravermelho que comumente se apresenta como uma banda larga.

TEOFILINA

A teofilina monohidratada possui canais formados por somente uma fileira de moléculas de água. Também apresenta uma camada onde é formado um dímero da molécula de teofilina que possui duas ligações de hidrogênio entre as ligações N-H----O=C (Figura 5a). Já a forma anidra (Forma II; Figura 5c) estável à temperatura ambiente, as ligações de hidrogênio são formadas pelas ligações N-H----N e portanto não são formados dímeros como na forma monohidratada.

Airaksinen et al. (S. Airaksinen, M. Karjalainen, E. Räsänen, J. Rantanen, J. Yliruusi, *International Journal of Pharmaceutics* 276 (2004) 129–141), acompanhou por difração de raios x a desitratação da teofilina monohidratada durante seu aquecimento até observar sua transformação para a teofilina Forma II. Durante o aquecimento a teofilina apresentou um padrão de difração diferente do padrão da Forma II e da forma monohidratada o qual foi denominado de um meta-estado (Forma*) instável, pois ele só é observado nas temperaturas entre 30°C e 50°C.

Zeitler et al. (J. A. Zeitler, K. Kogermann, J. Rantanen, T. Rades, P. F. Taday, M. Pepper, J. Aaltonen, C. J. Strachan, International Journal of Pharmaceutics 334 (2007) 78–84), estudou a mesma transformação da teofilina ou seja, sob aquecimento, utilizando espectros medidos na região do terahertz. Mais uma vez a transformação para a forma II foi observada, mas neste caso não foi observado a presença do meta-estado na durante a transição de fase. Os autores propõem a hipótese de que durante a transição, a concentração deste meta-estado é muito baixa para ser observada pelo THz. Além disso, durante o aquecimento são observados picos finos que são decorrentes do espectro rotacional do vapor de água. O vapor de água neste caso veio da evaporação da água do cristal.

Sakamoto et al. (T. Sakamoto, T. Sasaki, N. Katori, Y. Goda, *Journal of Infrared Millimeter and Terahertz Waves* (2016) 37:1007–1020) acompanhou, empregando espectroscopia THz, a transformação da teofilina monohidratada para a forma II sob aquecimento. Também foi acompanhado, por THz, a desidratação da teofilina monohidratada sob vácuo sem aquecimento. Neste último caso as bandas THz da forma monohidratada desaparecem com a desidratação e os autores sugerem que a teofilina é levada ao estado amorfo.

Na figura 6a são mostrados os espectros THz dos polimorfos, forma II (FII) e forma monohidratada (FM), da teofilina obtidos no laboratório. Na figura 6c, são mostrados espectros da FM medidos no tempo (curvas pretas de "a" até "k") onde a amostra em questão (pastilha contendo 100 mg de Polietileno + 50 mg de teofilina FM) permaneceu na câmara do THz purgada com nitrogênio seco. Pode-se observar que as bandas em 54 e 94 cm-1 decaem com o tempo indicando um processo de desidratação do cristal. No entanto a banda larga em 140 cm-1 permanece durante todo o processo. Não é observado nenhum indício de que houve uma transformação da FM na FII, pois não é











observado o aparecimento das bandas características da FII no THz. Depois do processo de desidratação a pastilha foi submetida à um ambiente húmido durante um dia e novamente foi medido seu espectro que apresentou o mesmo perfil do espectro da FM indicando que o polimorfo monohidratado foi reconstituído.

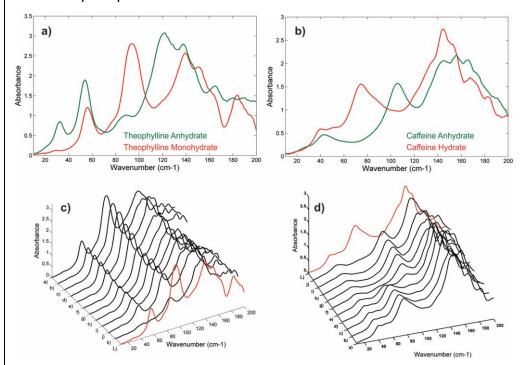


Figura 6. a) Espectros Terahertz de poliformos de teofilina e b) de polimorfos da cafeína. Processo de desidratação por um período de 5 horas (a – k) a temperature ambiente e sob atmosfera de nitrogênio gasoso sem umidade c) Teofilina and d) Cafeína. O espectro em vermelho em c) and d) foram obtidos após o processo de hidratação em sistema fechado com humidade controlada de 60% por 24 h.

A hipótese em avaliação, visto estes resultados e os da literatura, é que a teofilina FM, quando submetida à desidratação à temperatura ambiente, perde sua água mas as moléculas da teofilina se mantêm imóveis devido aos dímeros formados entre elas. Uma vez que esta desidratação ocorre à temperatura ambiente, a molécula não tem energia suficiente para quebrar o dímero para rotacionar e formar a FII que é o polimorfo anidro estável à 25°C. Um cálculo teórico quântico pode ajudar a comprovar essa hipótese prevendo se a banda em 140 cm⁻¹ é uma vibração do dímero provando que essa estrutura se mantem intacta o que permite a reconstituição do cristal hidratado.

No caso da desidratação sob aquecimento descrito na literatura a energia térmica permite que a molécula rotacione para tomar a posição da FII.

Outra questão é que a água deve ter um papel importante na vibração dos modos fônons uma vez que as bandas em 54 e 94 cm⁻¹ diminuem suas intensidades conforme a desidratação. A água deve coordenar a vibração do modo fônon o qual deve estar fora de compasso na sua ausência, como num sistema de três engrenagens onde a molécula água seria a engrenagem do meio e sem ela as outras duas não se movimentam coordenadas.

Um ensaio necessário para provar a hipótese é o acompanhamento da difração de raios x durante a desidratação isotérmica à 25°C. Para tanto, será desenvolvido uma câmara que será purgada com N_2 com um fluxo contínuo.











CAFEÍNA

Este projeto terá andamento com a investigação sobre o comportamento da cafeína e seus polimorfos.

III.3. ESTUDO COMPARATIVO DAS ESPECTROSCOPIAS NIR E RAMAN PARA IDENTIFICAÇÃO DE ADULTERAÇÃO DE CAFÉ SOMBREADO TORRADO E MOÍDO.

Planejamento das determinações dos parâmetros físico químicos de café:

Foi confeccionado um manual com as metodologias de determinações analíticas dos parâmetros físico-químicos das amostras de café (em anexo). Esse material foi produzido retirando partes do manual "Métodos físico-químicos para análises de alimentos" do Instituto Adolfo Lutz, 2008.

Os parâmetros Umidade, Cinzas, Cinzas insolúveis em ácido clorídrico, Cafeína, Extrato aquoso e Extrato etéreo foram selecionados para caracterização físico-química do café torrado e moído, com objetivo de realizar estudo comparativo destes parâmetros entre amostras de café sombreado, amostras de café produzido ao sol comercializados em supermercados e amostras de misturas de café sombreado e café produzido ao sol, com diferentes porcentagens de misturas.

As determinações serão realizadas no laboratório de química analítica da Universidade da Integração da Lusofonia Afro-Brasileira. A massa das amostras para as 6 determinações, em triplicata, deve ser no mínimo de 50 gramas. Para que possa ter a segurança de quantidade da amostra para algum possível erro experimental, planejou-se coletar e embalar 100 gramas de cada amostra analítica estudada.

Coleta das amostras de café sombreado

A coleta das amostras de café sombreado foi realizada nas cidades de produção de café orgânico, sob cultivo agroflorestal, na região do Maciço de Baturité/Ceará. Na Figura 7 são mostradas algumas amostras embaladas e identificadas pelo produtor do café e espécies da plantas coletas nas cidades de cidades de Guaramiranga, Baturité e Mulungu.



Figura 7. Amostras de café orgânico sob cultivo agroflorestal na região do Maciço de Baturité.

Essas amostras apresentadas na Figura 7 foram coletas em Fevereiro de 2017, antes do











planejamento das determinações analíticas e planejamento das misturas do café sombreado com café cultivado ao sol. Agora em Junho de 2018 novas coletas das amostras estão sendo realizadas com massa superior a 500g para que possa ser feito o planejamento de misturas com o café cultivado ao sol, em diferentes proporções de misturas para simulação de adulteração.

Café sob cultivo ao sol comercializado na cidade de Fortaleza

As amostras de café cultivado ao sol foram adquiridas em supermercados em Fortaleza/Ceará. A coleção de café ao sol é composta de 10 marcas e sabor diferentes, Figura 8A. As embalagens foram abertas e o conteúdo foi misturado em igual proporção para compor uma mistura que foi denominada "café ao sol", Figura 8B.





Figura 8. A) Amostras de 10 marcas de café cultivado ao sol disponíveis nos supermercados em Fortaleza/Ceará. B) Mistura das amostras de café cultivado ao sol.

A mistura de café ao sol será utilizada para fazer as simulações de adulterações das amostras de café sombreado. Correira et al. (2018) verificaram que em todas as amostras de café industrializados adqueridas no comércio possuiam algum nível de adulteração, em especial com milho. Assim, a simulação das adulterações do café sombreado com a mistura de café ao sol para prever algum nível de adulteração indireta de outros componentes diferentes de grão de café torrado e moído.

HOUVE ALTERAÇÕES NO CRONOGRAMA ORIGINAL? () SIM (X) NÃO

HOUVE PROBLEMAS E/OU DIFICULDADES NA EXECUÇÃO DO PROJETO?: (X)SIM ()NÃO

Em caso positivo indicar quais foram:

A liberação de recursos, já reduzidos, pelo CNPq está sendo feita de forma muito gradual, dificultando a realização de novas e continuidade de outras atividades de pesquisa.











A CAPES adotou critérios limitantes puramente de ordem financeira e em desacordo com sua missão dificultando a efetivação criteriosa das bolsas de mestrado e doutorado aprovadas para o INCTAA, prejudicando muito o andamento dos projetos.

As importações de equipamento multiusuário a ser instalado em instituições do Estado de São Paulo outras, que não a instituição sede (IQ-UNICAMP), não foram realizadas por problemas puramente burocráticos apontados pela FAPESP, que o coordenador tentou superar no período, porém sem sucesso. Assim, uma parte significativa dos projetos associados aos pesquisadores do INCTAA do Estado de São Paulo está parada, aguardando a decisão burocrática da FAPESP.

EQUIPE

HOUVE ALTERAÇÃO NA COMPOSIÇÃO ORIGINAL DA EQUIPE? (X)SIM ()NÃO

Em caso positivo indique o número de inclusões e exclusões:

Responsável p/ laboratório associado () Inclusão () Exclusão Justificar:

Pesquisador (X) Inclusão - 09 () Exclusão

Pesquisadores incluídos:

- 1. Roberta Cerasi Urban, CPF: 344.356.698-70, Universidade Federal de São Carlos SP.
- 2. Márcia Cristina Bisinoti, CPF: 275.047.558-93, Universidade Estadual Paulista, Campus de São José do Rio Preto SP.
- 3. Altair Benedito Moreira, CPF 663.218.409-04, Universidade Estadual Paulista, Campus de São José do Rio Preto SP.
- 4. Benedito Batista Farias Filho, CPF: 011889043-37, Departamento de Química Universidade Federal do Piauí Pl.
- 5. Mario Henrique Montazzolli Killner, CPF:038.363.059-25, Departamento de Química Universidade Estadual de Londrina EUL PR.
- **6.** Edilene Dantas Teles Moreira, CPF: 010.875.374-36, Universidade Federal da Paraiba, Campus II, Departamento de Química e Física-PB.
- 7. Marcelo Batista de Lima, CPF: 062.550.614-69, Universidade Federal Rural de Pernambuco, Unidade Acadêmica de Serra Talhada (UAST)-PE
- 8. Paulo Henrique Gonçalves Dias Diniz, CPF: 062.617.384-16, Universidade Federal do Oeste da Bahia UFOB, Departamento de Química-BA
- 9. Adriano de Araújo Gomes, 078.954.194-71, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Instituto de Química-RS











Justificativa: Os pesquisadores incluídos listados acima têm mantido colaborações com grupos de pesquisadores do INCTAA em temas nos quais o instituto atua e representam uma oportunidade de estender a rede a locais ainda não cobertos pela configuração atual. Alguns deles já são pesquisadores consolidados enquanto outros se incluem nos esforços promovidos pelo instituto voltados para o fomento de grupos emergentes, visando estender sua expertise por todo território nacional.

DESCREVER OS MECANISMOS DE INTERAÇÃO UTILIZADOS ENTRE GRUPOS DE PESQUISA PARTICIPANTES DO INCT:

O INCTAA mantém mecanismos virtuais que permitem a interação entre seus membros, como seu portal na internet. A página do INCTAA pode ser acessada no endereço: (http://inctaa. com.br/br/node/616). Porém, como durante a vigência do projeto anterior, os mecanismos presenciais (reuniões, visitas de curta duração e workshops) continuam sendo os mais efetivos para que os projetos em rede se desenvolvam.

A avaliação do projeto INCTAA anterior foi realizada pelo CNPq e resultou em sua classificação em 24°. lugar dentre os 245 projetos selecionados na nova chamada INCT/CNPq/FAPESP. Este fato foi comemorado pelos seus pesquisadores, que aguardaram com grandes expectativas a continuidade da sua proposta. Porém, devido às incertezas causadas pelo momento atual da economia nacional e das medidas restritivas governamentais o Workshop de lançamento da 2ª. Fase do INCTAA, um dos mecanismos mais eficazes de interação para a rede, previsto para 2017, não foi realizado da forma que gostaríamos, tendo sido limitado o número de participantes.

O intercâmbio de alunos orientados por pesquisadores do INCTAA constitui uma importante ferramenta de integração entre os diversos grupos ao realizarem, em diversas instituições, trabalhos e medidas complementares associadas ao parque instrumental do INCTAA. Neste período, o número de visitas, como no período anterior, teve de ser foi reduzido, de acordo com os recursos disponíveis, o que causou impacto direto na produção acadêmica do instituto.

Reiteramos que a flexibilização e manutenção deste intercâmbio é essencial para a execução das propostas de pesquisa do INCTAA e para a formação dos alunos de pós-graduação. Portanto, consideramos que os recursos alocados pelo CNPq e FAPESP para o projeto, podem e devem ser utilizados no financiamento (por meio do pagamento de despesas de locomoção e diárias) destas atividades que contribuem significativamente para a formação dos alunos de mestrado e doutorado envolvidos no projeto, para o bom andamento das linhas de pesquisa do INCTAA e da otimização do uso dos equipamentos distribuídos em seus diversos laboratórios.











RELATAR EVENTUAIS DIFICULDADES ENCONTRADAS ENTRE OS GRUPOS DE PESQUISA PARTICIPANTES DA REDE E POSSÍVEIS MECANISMOS UTILIZADOS PARA SUPERAR ESTAS DIFICULDADES:

As dificuldades atuais enfrentadas pelos grupos de pesquisa do INCTAA advêm do corte (38%) imposto aos recursos alocados ao INCTAA, sendo que, desta vez, diferente daquela anterior, o valor das bolsas aprovadas pela CAPES foram subtraídos, do montante aprovado pelo CNPq, o que resultou em um corte superior a 50% em relação aos recursos de material permanente e de custeio disponíveis execução do projeto, que nos levou a redimensionar seus objetivos específicos.

Além disso, O INCTAA vem enfrentando problemas burocráticos que impactam desfavoravelmente o tempo necessário para a realização das importações de materiais permanentes e de consumo necessários aos diversos grupos de pesquisadores da rede.

A CAPES adotou uma política restritiva de uso de recursos de bolsas de mestrado e doutorado, limitando o acesso criterioso às bolsas e prejudicando sensivelmente o andamento dos projetos desenvolvidos pela rede do INCTAA.

Infelizmente, apesar dos esforços do Comitê Gestor e do coordenador do INCTAA, estas dificuldades não puderam ser superadas, pois não estão sobre nosso controle.

HOUVE A INCLUSÃO OU EXCLUSÃO DE INSTITUIÇÕES E EMPRESAS? (X)SIM ()NÃO

EM CASO POSITIVO INDIQUE O NÚMERO: 5

Instituição de Ensino e/ou Pesquisa (X) Inclusão () Exclusão

Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas - Universidade Estadual Paulista, Campus de São José do Rio Preto – SP.

Departamento de Química - Universidade Federal do Piauí - PI.

Departamento de Química - Universidade Estadual de Londrina - UEL – PR.

Departamento de Química e Física - Universidade Federal da Paraiba, Campus II

Departamento de Química - Universidade Federal do Oeste da Bahia - UFOB - BA

Justificar: Estas instituições se comprometeram com a participação dos seus pesquisadores no projeto INCTAA e representam a oportunidade de extensão da rede do instituto em regiões do Estado de São Paulo e Brasil ainda não eram abrangidas pelo projeto inicial.

Empresas () Inclusão () Exclusão











RESULTADOS OBTIDOS / METAS

COMENTE OS 3 (TRÊS) PRINCIPAIS RESULTADOS CIENTÍFICOS E/OU TECNOLÓGICOS OBTIDOS NO PERÍODO (01/07/2017 – 30/06/2018) PARA:

A - PESQUISA:

O INCTAA iniciou no período seu 8º. ano de vigência ininterrupta. Desta forma, diversos projetos foram concluídos no período referente a este relatório em consequência das atividades promovidas pelo instituto que puderam ter solução de continuidade. Estas atividades geraram muitos resultados importantes para a área da Química Analítica e dentre elas destaca-se aqui as três que mais se sobressaíram em termos de qualidade e relevância nacional e internacional na área de atuação em pesquisa:

A1. Desenvolvimento de métodos analíticos para a área forense:

- Silva, C. S.; Pimentel, M. F.; Amigo, J. M.; Honorato, R. S.; Pasquini, C. Detecting semen stains on fabrics using near infrared hyperspectral images and multivariate models. *TRAC-Trends in Analytical Chemistry*, 95 (2017) 23-35.
- Oliveira, V. S.; Honorato, R. S.; Honorato, F. A.; Pereira, C. F. Authenticity assessment of banknotes using portable near infrared spectrometer and chemometrics. *Forensic Science International*, 286 (2018), 121-127.
- Marra, M. C.; Costa, B. M. C.; Munoz, R. A. A.; Santana, M. H. P.; Maldaner, A. O.; Botelho, E. D.; Coltro, W. K. T.; Richter, E. M. Fast determination of cocaine and some common adulterants in seized cocaine samples by capillary electrophoresis with capacitively coupled contactless conductivity detection. *Analytical Methods*, 10 (2018) 2875-2880.
- da Silva V.O.; Honorato, R.S.; Honorato, F. A.; Pereira, C. F. Classification of Brazilian and foreign gasolines adulterated with alcohol using infrared spectroscopy. *Forensic Science International*, 286 (2018), 121-127.
- Pereira, J. F. Q.; Silva, C. S.; Vieira, M. J. L.; Pimentel, M. F.; Braz, A.; Honorato, R. S. Evaluation and identification of blood stains with handheld NIR spectrometer. *Microchemical Journal*, 133 (2017) 561-566.

Estes cinco artigos publicados em periódicos de alto índice de impacto exemplificam a atuação do INCTAA na área forense, na qual ele desenvolve métodos analíticos para coibir fraudes e auxiliar na coleta de provas em cenas de crime. Em conjunto, estes quatro artigos representam o estado da arte em química forense, explorando imagens hiperespectrais no infravermelho próximo, e instrumentos portáteis para monitoramento de fraudes em campo, além do desenvolvimento de métodos empregando técnicas analíticas de última geração na determinação de contaminantes e teores de ativos em drogas de abuso.











A2. Estudos sobre biodisponibilidade de elementos essenciais e tóxicos em alimentos.

- do Nascimento da Silva, Cidade, M.; Heerdt, G.; Ribessi, R.L.; Morgon, N.H.; Cadore, S. Effect of Selenite and Selenate Application on Mineral Composition of Lettuce Plants Cultivated Under Hydroponic Conditions: Nutritional Balance Overview Using a Multifaceted Study. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 29(2) (2018) 371-379.
- do Nascimento da Silva, E.; Aureli, F.; D'amato, M.; Raggi, A.; Cadore, S.; Cubadda, F. Selenium Bioaccessibility and Speciation in Selenium-Enriched Lettuce: Investigation Of the Selenocompounds Liberated After In Vitro Simulated Human Digestion using Two-dimensional HPLC-ICP-MS. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 65 (2017) 3031-3038.
- do Nascimento da Silva, E.; Farias, L.O.; Cadore, S. The Total Concentration and Bioaccessible Fraction of Nutrients in Purées, Instant Cereals and Infant Formulas by ICP OES: a Study of Dietary Recommended Intakes and the Importance of using a Standardized in vitro Digestion Method. *Journal of Food Composition and Analysis*, 68 (2018), 65-72.
- Pereira, C.C.; do Nascimento da Silva, E.; Souza, A.O.; Vieira, M.A.; Ribeiro, A.S.; Cadore, S. Evaluation of the Bioaccessibility of Minerals from Blackberries, Raspberries, Blueberries and Strawberries. *Journal of Food Composition and Analysis*, 68 (2018), 73-78.

A avaliação nutricional de alimentos somente pode ser realizada de forma efetiva se puder ser computada a fração que está disponível para ser absorvida pelo organismo. Os quatro artigos gerados pelos pesquisadores do INCTAA listados acima abordam esta importante e atual temática voltada para a valoração nutricional real de alimentos. Além disso, estes experimentos realizados in vitro permitem substituir a experimentação com uso de animais. O conjunto de artigos mostra o desenvolvimento desta área no Brasil e exibe resultados relevantes relacionados a avaliação nutricional de alimentos.

A qualidade e relevância dos trabalhos realizados pelo grupo liderado pela Profa. Solange Cadore neste tema, foram reconhecidas pela concessão do prêmio: Peixoto, R. A. e Cadore, S. MCTIC DE MÉTODOS ALTERNATIVOS À EXPERIMENTAÇÃO ANIMAL. 1º lugar na Categoria Produção Acadêmica com o trabalho "Métodos de Bioacessibilidade In vitro e o Uso de Células CACO 2 em Estudos In vitro de Biodisponibilidade", resultado da tese de doutorado de Rafaella Regina Alves Peixoto - UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Solange Cadore - 2017.

A3. Uso analítico da espectroscopia THz no domínio do tempo

- Silva, V. H.; Vieira, F. S.; Rohwedder, J. J. R.; Pasquini, C; Pereira, C. F. Multivariate quantification of mebendazole polymorphs by terahertz time domain spectroscopy (THz-TDS). *Analyst*, 142 (2017), 1519-1524.

Os pesquisadores do INCTAA são pioneiros na América do Sul em desenvolver métodos analíticos baseados em espectroscopia THz no domínio do tempo. O exemplo acima representa uma forma inovadora de monitorar a qualidade de fármacos permitindo acessar a sua composição polimórfica. Diferentes polimorfos têm ação terapêutica distintas e afetam significativamente a farmacocinética dos medicamentos. Assim, o desenvolvimento feito pelo INCTAA agregou uma nova ferramenta para o controle de qualidade de medicamentos que poderá ser empregada pela indústria farmacêutica.











B – FORMAÇÃO DE RECURSOS HUMANOS:

- Curso em Espectroscopia no Infravermelho Próximo e Técnicas de Modelamento Multivariado

Data da realização: 14 a 16 de maio de 2018.

Local: Embrapa Pecuária Sudeste - São Carlos - SP

Carga horária: 20 horas Professor: Dr. Celio Pasquini

Organizadores: Gilberto Batista de Souza (Embrapa Pecuária Sudeste), Ana Rita de Araújo Nogueira (Embrapa Pecuária Sudeste) e Maria Lúcia Ferreira Simeone (Embrapa Milho e Sorgo.

Público-alvo: Institutos de pesquisa, Universidades, laboratórios prestadores de serviços de análise de alimentos e fábricas de ração.

Objetivos: Capacitar os usuários da técnica NIRS em desenvolvimento de modelos de calibração multivariada para uso na avaliação da qualidade de alimentos.

Número de participantes: 48 participantes

- 9º Workshop Ensaio de proficiência para laboratórios de nutrição animal (EPLNA) 17-18/maio/2018. Embrapa Pecuária Sudeste, São Carlos-SP, Brasil.
- Canela, M.C. O contaminante nosso de cada dia, Mesa redonda, Pint of Science, 2018. https://pintofscience.com.br/events/campos, Campos dos Goytacazes-RJ, Brasil.
- Coelho, C. J. Organizador: Il Jornada Científica da Escola de Ciências Exatas e da Computação 2017.
- Sodré, F. F. Organização, em andamento, do 19º Encontro Nacional de Química Analítica (ENQA).
- Sodré, F. F. Ação de divulgação científica: Post publicado na página Campus Online do Facebook. https://www.facebook.com/onlinecampus/posts/1648138265282150
- Montagner, C. C. Mini-curso. Contaminantes emergentes: dinâmica e toxicidade. I Escola de Química Ambiental (IEQA 2018) da UNESP (2018), São José do Rio Preto, SP. Brasil. (4 horas)

C – TRANSFERÊNCIA DE CONHECIMENTO E TECNOLOGIA:

Nada consta no período.

D – EDUCAÇÃO E DIVULGAÇÃO DA CIÊNCIA:

D1. Artigos de revisão e educacionais publicados:

- Pasquini, C.; Near infrared spectroscopy: A mature analytical technique with new perspectives A review. *Analytica Chimica Acta*,1026 (2018) 8-36.
- Brito, L. R. E.; Martins, A. R.; Braz, A.; Chaves, A. B.; Braga, J. W. B.; Pimentel, M. F. Critical review and trends in forensic investigations of crossing ink lines. *TRAC-Trends in Analytical Chemistry*, 94 (2017) 54-69.
- Amais, R. S.; Rocha, F. R. P.; Nóbrega, J. A. Background signals in instrumental analysis: an essential discussion in undergraduate courses. *Química Nova*, 40 (2017) 228-227.











D2. Capítulos de livros:

- Marques, E. J. N.; Freitas, S.T.; Neto, A.F.; Cavalcante, I.H.L. . Espectroscopia na região do infravermelho próximo (NIR): técnica analítica não destrutiva para determinação da qualidade de manga. In: Neto, A.F.; Almeida; F.A.C.; Cavalcante, I.H.L.. (Org.). Manga: Maturação, colheita e conservação. 1ed.Juazeiro, BA: UNIVASF, 2017, v. 1, p. 60-87.
- Souza, G, B.; Nogueira, A. R. A.; Olivares, I. R. B.; Vieira, O. V. Programas de Ensaio de Proficiência. 2017. In. Compêndio Brasileiro de Alimentação Animal. Sindirações, 2017.
- Souza, G. B.; Fujieda, R. J. Y. Avaliação da Repetibilidade e Reprodutibilidade de Métodos de Proteína Bruta: Estudo Colaborativo. In. Compêndio Brasileiro de Alimentação Animal. Sindirações, 2017.

D3. Palestras proferidas pelos pesquisadores do INCTAA:

- Cadore, S. A Importância e a Beleza da Química na Vida de Todos Nós, 06/11/2017,
 Colégio Santana (2º Grau), Antonio Prado, RS
- Cadore, S. Pesquisa e Publicações Científicas: Ética no Ambiente Acadêmico. ITAL/Campinas, Campinas, SP, 18/09/17
- Cadore, S. Como Avaliar a Contribuição dos Minerais na Dieta Alimentar? Semana de Química, UFRR, Boa Vista, RR, Brasil, 16/11/2017
- Freitas, S.T. Equipamento com infravermelho permite análise pós-colheita sem danos à manga. Jornal do Semiárido, n.48, Petrolina, PE, p. 7-7, 01 dez. 2016.
- Freitas, S.T. Manejo, beneficiamento e indicadores de qualidade em mangas para exportação. Desafios na produção, mercado e a expansão do cultivo de manga no Vale do São Francisco. Embrapa Semiárido/Serviço Nacional de Aprendizagem Rural (SENAR). Palestra, 2018.
- Freitas, S.T. Tecnologias para o monitoramento da maturação e qualidade de frutos de forma não destrutiva. 2017. I Seminário de Atualização Tecnológica em Fruticultura. Embrapa Semiárido/Serviço Nacional de Aprendizagem Rural (SENAR). Palestra, 2017.
- Grassi, M.T. Determination of labile metallic species in natural waters using diffusive gradients in thin-film (DGT) devices modified with montmorillonite and vermiculite. Seminário apresentado em visita técnica à Universidad de Caldas, Manizales, Colômbia, em 5/10/2017.
- Grassi, M.T. Você conhece a composição da água que bebe? In: Encontro Paranaense de Estudantes de Química. Guarapuava-PR, Brasil. Seminário proferido em 28/7/2017.
- -Nogueira, A. R. A. A Química Analítica no Contexto da Agropecuária. Universidade Estadual da Bahia. 31 de julho de 2017, Salvador-BA, Brasil (Apresentação: Palestra).
- Nogueira, A. R. A. Determinação de contaminantes inorgânicos em alimentos e fertilizantes. I Simpósio de Integração da Pós-graduação. Universidade Federal de Viçosa, Campus Rio Paranaíba, 2017, Rio Paranaíba-MG (Apresentação: Palestra).
- Nogueira, A. R. A., Análises para contaminantes inorgânicos. I Workshop de Nutrição Animal, 2017, LANAGRO Pedro Leopoldo-MG (Apresentação: Palestra).











- Raimundo Jr. I.M.; LIBS como ferramenta analítica no estudo de fontes hidrotermais oceânicas. In: 41a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2018, Foz do Iguaçu, Paraná. (oral)
- Rocha, F. R. P. Flow Analysis: Looking back and forward. Invited lecture. In: 46th World Chemistry Congress (IUPAC-2017), 2017, São Paulo-SP, Brasil.
- Rocha, F. R. P. Novas alternativas para a detecção de adulterações em leite. In: 4º Congresso Analitica Latin America, 2017, São Paulo-SP, Brasil.
- Souza, G. B. Análises Bromatológicas Produtos Vegetais I Workshop de Nutrição Animal, 2017, LANAGRO Pedro Leopoldo-MG.
- Souza, G. B. Ferramentas estatísticas de aplicação no laboratório. I Workshop de Nutrição Animal, 2017, LANAGRO Pedro Leopoldo-MG.

D3. Trabalho de divulgação e popularização da Química realizado pelos pesquisadores do INCTAA em Serra Talhada – PE e região.

SEMANA DE QUÍMICA DA UNIDADE ACADÊMICA DE SERRA TALHADA

Durante a semana de química 16 a 20 de outubro de 2017 – várias atividades de divulgação da química analítica foram realizadas.

Destacando palestras e minicursos ministrados pelos professores do INCTAA abaixo

PALESTRAS MINISTRADAS POR MEMBROS DO INCTAA

- Brito, Andréa Monteiro Santana Silva. Água no preparo de bebidas e alimentos: diretrizes ambientais e padrão de qualidade.- 18 de outubro de 2017. (UAST/UFRPE)

MINICURSOS MINISTRADOS POR MEMBROS DO INCTAA

- Gaião, Edvaldo da Nóbrega, Espectrometria de absorção molecular aplicado a análise de alimentos: teoria e prática. (UFRPE/UAST), outubro, 2017.
- Nascimento, Elaine Cristina Lima, Novas metodologias analíticas para o controle de qualidade de alimentos, (UFRPE/UAST), outubro 2017.

ATIVIDADE DE ATENDIMENTO DENTRO DA UNIVERSIDADE - ALUNOS DO ENSINO MÉDIO.

No dia 10 de outubro de 2017 os alunos do 2º e 3º anos da escola **ESCOLA DARIO GOMES DE LIMA**, município de Flores, visitaram o laboratório do Grupo de Instrumentação e Análises Químicas na Unidade Acadêmica de Serra Talhada/UFRPE. Estas visitas são promovidas pelos pesquisadores do INCTAA com o objetivo de despertar o interesse dos alunos pela ciência, em particular a área da química analítica.













Alunos do ensino médio visitando o laboratório de química analítica da UAST/UFRPE.

ATIVIDADES EM ESCOLAS DA REGIÃO – em outros municípios do alto sertão do Pajeú.

• MUNICÍPIO DE FLORES

ESCOLA MUNICIPAL ONZE DE SETEMBRO (20 de outubro de 2017)

Feira de Ciências Cultura e Arte – instalou-se o stand de produção de sabão – sustentabilidade e meio ambiente. Aplicando e divulgando a química durante o evento.



Popularização da química analítica na feira de ciências da ESCOLA MUNICIPAL ONZE DE SETEMBRO.

ESCOLA DARIO GOMES DE LIMA (23 E 24 DE NOVEMBRO DE 2017) – Il Feira de Ciências Inovação e Tecnologia - várias atividades foram realizadas na escola, entre elas a divulgação da química aplicada.













Popularização da química analítica na feira de ciências da escola ESCOLA DARIO GOMES DE LIMA.

MUNICÍPIO DE SERRA TALHADA

JORNADA DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E EXTENSÃO E JORNADA DE INICIAÇÃO À DOCÊNCIA (JINCE/ JID 2017). 26 de outubro, 2017.

A professora Andréa Monteiro, pesquisadora do INCTAA, fez uma palestra sobre a formação docente: desafios e superações no alto Sertão do Pajeú, onde destacou a importância do INCTAA no fortalecimento do grupo de professores de química analítica para superação de alguns desafios no ensino e pesquisa.

• FEIRA DE PROFISSÕES - STAND DE QUÍMICA ANALÍTICA PARA DIVULGAÇÃO ENTRE OS ESTUDANTES DO ENSINO MÉDIO (31 / 10 a 01/11 de 2017).

Instrumentação analítica foi o foco, apresentando os instrumentos analíticos construídos (fogão solar, espectrofotômetros, condutivímetros, viscosímetros, etc).

AULA PRÁTICA INTERDISCIPLINAR, UTILIZANDO EQUIPAMENTO CONSTRUÍDO COM APOIO DO INCTAA, 19 de dezembro de 2017.

LOCAL: BARRAGEM JAZIGO, SERRA TALHADA-PE.

EQUIPAMENTO: ESPECTROFOTÔMETRO UV-VIS

Nesta atividade foram realizadas análises químicas relacionadas a qualidade da água, e em conjunto com a disciplina bioquímica, foi feita a determinação enzimática, utilizando medidas de transmitância no equipamento portátil construído pelo professor Edvaldo, pesquisador do INCTAA.













Aula prática no curso de engenharia de pesca da UAST, utilizando um espectrofotômetro UV-VIS construído pelo membro do INCTAA, Prof. Edvaldo Gaião.

 PRODUÇÃO DE MATERIAL DIDÁTICO PARA FACILITAR O ENTENDIMENTO NA ÁREA DE QUÍMICA ANALÍTICA COM APLICAÇÃO EM DIVERSAS DISCIPLINAS.

Seguem abaixo alguns exemplos de instrumentos desenvolvidos para auxílio no ensino de química nas escolas fundamentais e na universidade.

Balança modelo de átomo para reações de oxidação redução

Instrumento pensado e desenvolvido para exemplificar de forma visual o processo de oxidação e redução de um elemento químico, o elemento (balança) mostra ao estudante através de um ponteiro seu estado de oxidação quando o mesmo ganha ou perde elétrons.

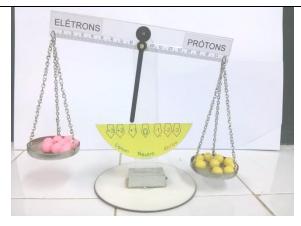












Balança modelo de átomo para reações de oxidação redução

Destilador solar

Instrumento pensado e desenvolvido para demonstrar de forma visual conceitos como transferência de calor, radiação eletromagnética, mudança de fase e processos de destilação.



Destilador Solar

Fogão solar

Instrumento pensado e desenvolvido para demonstrar de forma visual conceitos termodinâmicos e cálculos de potência térmica.



Fogão solar











Projeto SOU + UAST (DIVULGAÇÃO DOS CURSOS DE GRADUAÇÃO E POPULARIZAÇÃO CIENTÍFICA)

A professora Andréa apresentou a área de química como carreira promissora para alunos do ensino médio e destacou a química analítica, 11 de maio de 2018.



Projeto SOU + UAST, no final, apresentação do INCTAA aos alunos do Ensino Médio.

ENUMERE OS ATÉ 03 (TRÊS) PRINCIPAIS IMPACTO(S) CAUSADO(S) PELAS AÇÕES E RESULTADOS DO PROJETO PARA A AMPLIAÇÃO, MELHORIA E CONSOLIDAÇÃO DA COMPETÊNCIA TÉCNICO-CIENTÍFICA NACIONAL PARA:

A - PESQUISA:

- **A1.** Desenvolvimento de métodos analíticos baseados em imagens hiperespectrais no infravermelho próximo (NIR) e em novos equipamentos portáteis e de baixo custo para análises de interesse do setor forense, visando a avaliação de cenas de crime, identificação de fraudes e falsificações. **Impacto:** disponibilização de métodos modernos e objetivos de análise, inclusive baseados em instrumentos de campo que irão podem permitir a análise mais eficiente de cenas de crime, fiscalização da qualidade dos combustíveis em campo e identificação de notas falsificadas.
- **A2.** Consolidação da linha de pesquisa e seus resultados em biodisponibilidade de elementos químicos em alimentos, que impacta na forma como compreendemos e avaliamos o efeito toxicológico e/ou nutricional da presença de metais em alimentos. **Impacto:** Melhor conhecimento sobre o potencial nutritivo e/ou tóxico da presença de elementos químicos em alimentos, o que poderá refletir em políticas públicas voltadas para a área da saúde e segurança alimentar. A qualidade e relevância destes trabalhos foram reconhecidos por meio de prêmio concedido pelo MCTI.
- **A3.** Construção de instrumento multifuncional que inclui a sua operação com espectroscopia Raman na região THz de baixa energia. **Impacto:** Os resultados que serão obtidos por este equipamento deverão impactar a indústria de fármacos, provendo uma ferramenta analítica única capaz de avaliar a qualidade de princípios ativos e medicamentos em relação a fenômenos como o polimorfismo.











B – FORMAÇÃO DE RECURSOS HUMANOS:

- **B1.** Formação de15 mestres e 14 doutores orientados pelos pesquisadores do INCTAA em diversos centro de pesquisa e ensino participantes do instituto.
- **B2.** Curso em Espectroscopia no Infravermelho Próximo e Técnicas de Modelamento Multivariado. Este curso proporcionou a formação de pessoal de empresas produtoras de ração animal na tecnologia NIR.
- **B3.** Organização, por pesquisadores do INCTAA, do 9º Workshop Ensaio de proficiência para laboratórios de nutrição animal (EPLNA) 17-18/maio/2018. Embrapa Pecuária Sudeste, São Carlos-SP, Brasil. Este workshop contribuiu decisivamente para a melhoria do desempenho dos laboratórios participantes, influenciando favoravelmente a qualidade dos resultados analíticos produzidos com impactos diretos na produtividade agrícola e pecuária brasileira.

C – TRANSFERÊNCIA DE CONHECIMENTO E TECNOLOGIA:

Nada consta no período.

D – EDUCAÇÃO E DIVULGAÇÃO DA CIÊNCIA:

- **D1.** Ações desenvolvidas no município de Serra Talhada, PE voltadas à divulgação da Química, Química Analítica e do INCTAA junto a alunos de 2º grau e comunidades próximas. O impacto destas ações é medido por meio do aumento significativo do interesse destes jovens pela ciência e pela Química e Química Analítica em particular.
- **D2.** Artigos de revisão e educacionais publicados e capítulos de livros publicados. O material produzido pelos pesquisadores do INCTAA representa o estado da arte em nível internacional nas especialidades em pesquisa e inovação abordadas pelos temas desenvolvidos pelo instituto e permitem a disseminação do conhecimento de forma abrangente.
- **D3.** Divulgação de pesquisa desenvolvida pelo INCTAA de abrangência e relevância para o cidadão comum, relacionada à possibilidade de análise in situ de frutas e produtos comerciais visando evitar fraudes e selecionar frutas com qualidade interna, de forma não destrutiva.











PARA FINS DE DIVULGAÇÃO, RELACIONAR RESULTADOS OBTIDOS QUE MEREÇAM DESTAQUE PARA O DESENVOLVIMENTO CIENTÍFICO, TECNOLÓGICO E/OU SOCIAL:

Os temas de maior apelo para divulgação dos resultados alcançados pelo INCTAA para a sociedade em geral são descritos abaixo e foram desenvolvidas ainda na fase anterior do INCTAA:

A Espectroscopia no Infravermelho Próximo (NIR) Próxima ao Consumidor

Durante muito tempo a espectroscopia de refletância difusa na região do infravermelho próximo somente podia ser utilizada por pessoal especializado, atuando nos ambientes controlados dos laboratórios. Porém, o advento dos instrumentos extremamente portáteis, denominados de MicroNIR, robustos e de uso muito simples, além dos sistemas de computação e transmissão digital de dados estão permitindo que as medidas e as conclusões sobre as análises espectroscópicas, antes inacessíveis às pessoas comuns, possam ser realizadas no local de venda de produtos pelo próprio consumidor. Este fato gerou o tema de pesquisa da Dissertação de Mestrado do Sr. Matheus Angeluzzi Jardim que propõe desenvolver um equipamento baseado em um MicroNIR para ser colocado no local de venda de frutas e tecidos, permitindo, por exemplo, que o consumidor ateste a qualidade do produto em tempo real. A proposta está sendo avaliada com sucesso para frutas como maçãs, laranja, kiwi, ameixas e tecidos como couro, seda, algodão, poliéster e misturas de fibras sintéticas e naturais em diversas proporções.

Sistema ambientalmente amigável para recuperação de índio de lixo eletrônico

Alguns metais são muito importantes nos dias de hoje, pois são usados para gerar novos produtos tecnológicos que facilitam a vida humana, como telas planas de TV e computadores, placas de aquecedor solar, fios de solda de alta pureza, produção de circuitos eletrônicos, etc. O índio é um desses metais e tem sido largamente usado, por causa disso, apesar das reservas naturais de índio girarem em torno de 10700 toneladas mundialmente, sua alta demanda demonstra que as reservas naturais irão se esgotar em menos de 20 anos.

Uma das saídas para este problema é obter índio a partir de lixo eletrônico, gerando assim fontes secundárias deste metal. Para que isso seja possível é necessário o desenvolvimento de sistemas de recuperação de índio que sejam eficientes, mas que também sejam sustentáveis tanto do ponto de vista econômico, quanto ambiental.

Uma alternativa interessante é o uso de sistema aquoso bifásico (SAB) desenvolvido pelo grupo de pesquisadores do INCTAA atuando na Universidade Federal de Viçosa — MG, pois este é sustentável economicamente e ambientalmente, pois seus componentes são de baixo custo, biodegradáveis e podem ser reaproveitados. Além disso, o principal componente do SAB é água o que produz um sistema de recuperação isento de solventes orgânicos que são muitas vezes tóxicos e inflamáveis. O SAB é formado por três componentes e como já dito um desses componentes é sempre água, mas os outros dois são as mais variadas substâncias químicas. Isto faz com que o SAB seja apropriado para recuperar não somente índio, como também diversos outros metais de importância econômica. Um SAB constituído por um polímero, sal e água foi aplicado com sucesso para a recuperação de índio de telas de computadores descartados no ambiente. A recuperação de índio foi igual a 95 % o que corresponde a produção de 0,3 g de índio por cada quilograma de tela de computador com pureza de 93 %.

O SAB é muito promissor para ser aplicado para recuperação de metais, pois além das vantagens já descritas acima ele é facilmente ampliado para larga escala e pode ser utilizado por pessoal menos qualificado, devido a sua simplicidade de operação e baixo risco a saúde humana. Este sistema poderia ser usado em diferentes cidades a fim de gerar valor agregado ao lixo eletrônico presente em qualquer uma delas. Isto traria benefícios econômicos e ambientais, pois os metais de interesse seriam reaproveitados e ao mesmo tempo a natureza não estaria sendo degradada, seja por descarte inadequado de metais, seja pela extração desses metais diretamente das reservas naturais.











O que pode ter na água potável (Contaminantes Emergentes)

O Brasil, embora tenha uma economia que o coloca entre os dez países mais ricos do mundo, tem um problema crônico no tocante ao saneamento básico. O baixo índice de tratamento de esgoto tem seu reflexo na qualidade das águas superficiais do nosso país, as quais recebem uma carga orgânica elevada oriunda do despejo de esgoto *in natura* nos nossos rios e lagos. Como grande parte destes corpos aquáticos é constituída por mananciais que suprem a demanda da água de abastecimento das cidades brasileiras, existe uma preocupação com a qualidade e a potabilidade das águas que são servidas à população.

Somando-se a esta realidade, o país tem vivenciado um aumento nos padrões de consumo, o que faz com que uma série de novas substâncias atinjam os cursos d'água, as quais são chamadas de contaminantes emergentes (CE). Dentre os CE podemos apontar diversos tipos de nanomateriais, bloqueadores solar, agentes anti-chama, hormônios naturais e sintéticos, drogas ilícitas, resíduos de fármacos e produtos de higiene pessoal, dentre outros.

Pouco sabemos como estas substâncias, presentes em concentrações muito baixas, interagem com o organismo humano, muito embora já se conheçam os efeitos maléficos que podem causar em inúmeros animais como nos peixes, por exemplo. É sabido que peixes machos expostos a concentrações elevadas de esgoto doméstico apresentam altos índices de feminização. No entanto, os efeitos da exposição crônica ao ser humano ainda precisam ser esclarecidos. Por se tratar de um assunto relativamente recente, grande parte destes compostos ainda não são legislados, e assim sendo, não há valores máximos permitidos na água servida á população.

Uma das tarefas do INCTAA é o de avaliar a situação de um número significativo de cidades brasileiras (principalmente as capitais) quanto á presença destes CE na água de abastecimento, procurando identificar os que ocorrem com maior frequência e suas concentrações nestas águas. Esses dados são fundamentais para nortear políticas públicas para se estabelecer padrões de potabilidade contemplando estas substâncias, além do controle dos mesmos nas estações de tratamento de água.

RESULTADOS EM NÚMEROS

A – INDICADORES DE PESQUISA				
NÚMEROS DA PRODUÇÃO TÉCNICO-CIENTÍFICA E ARTÍSTICA NO PERÌODO				
(Para detalhamento: ver ANEXO I)				
TIPO	QUANTIDADE			
SOFTWARE	-			
PATENTES	-			
PRODUTOS	-			
PROCESSOS	-			
PRODUÇÃO ARTÍSTICA (ESPECIFICAR)	-			
OUTROS (ESPECIFICAR):	-			
ARTIGOS PUBLICADOS NO PERÍODO	55			

B – INDICADORES DE TRANSFERÊNCIA DE CONHECIMENTO E TECNOLOGIA			
TIPO	QUANTIDADE		
-	-		











C – INDICADORES DE EDUCAÇÃO E DIVULGAÇÃO DA CIÊNCIA NÚMEROS DA PRODUÇÃO NO PERÍODO (Para detalhamento: ver ANEXO I)				
TIPO	QUANTIDADE			
Cursos, Disciplinas e Treinamentos	01			
Eventos Realizados	03			
Teses de Doutorado Concluídas	14			
Dissertações de Mestrado Concluídas	16			
Palestras e Seminários (Nacionais e Internacionais) Proferidos pelos Pesquisadores do INCTAA	17			
Participação em Congressos	34 nacionais 17 internacionais			
Livros	-			
Capítulos de livros	03			

INFORMAÇÕES ADICIONAIS

FORMAS DE DISPONIBILIZAÇÃO PÚBLICA DOS RESULTADOS DO PROJETO:

Os principais resultados produzidos pelo INCTAA foram compilados e podem ser acessados na página do instituto na web (http://www.inctaa.com.br/), onde, por exemplo, todos os relatórios de atividades resultantes da atuação do INCTAA podem ser acessados.

Participação em Seminários e Conferências: Atendendo à convites, o coordenador e diversos pesquisadores do INCTAA têm participado de seminários e conferências e eventos, nos quais as atividades e resultados do INCTAA são divulgados.

Reportagens: de agências de financiamento de pesquisa (FAPESP, por exemplo) e de veículos da mídia impressa e falada.

COMENTE AS PRINCIPAIS MELHORIAS IMPLANTADAS NAS INSTALAÇÕES FÍSICAS DA SEDE E DOS LABORATÓRIOS ASSOCIADOS AO INSTITUTO, COMO ADAPTAÇÕES FÍSICAS, EQUIPAMENTOS, ETC.:

O espectrofotômetro Raman capaz de operar em baixas frequências teve sua construção e instalação iniciada nos laboratórios do Grupo de Instrumentação e Automação em Química Analítica do Instituto de Química da UNICAMP.



EM CASO POSITIVO COMENTAR:









HOUVE ATIVIDADES DE INTEGRAÇÃO COM OUTROS INCT'S: (X)SIM ()NÃO

Houve uma pequena interação (ainda que aquém da desejada) com o INCTBIO que geraram os trabalhos publicado:

- Villa, J.E.L.; Pasquini, C.; Poppi, R.J. Coupling of the ring-oven-based preconcentration technique and surface-enhanced Raman spectroscopy: Application for the determination of purine bases in DNA. *Analytica Chimica Acta*, 991(2017), 95-103. (em colaboração com pesquisadores do INCTBIO).
- Paiva, E. M.; Da Silva, V. H.; Poppi, R. J.; Pereira, C. F.; Rohwedder, J. J. R. Comparison of macro and micro Raman measurement for reliable quantitative analysis of pharmaceutical polymorphs. *Journal of pharmaceutical and biomedical analysis*, 157 (2018), 107-115. DOI: https://doi.org/10.1016/j.jpba.2018.05.010
- -Bizzi, C. A.; Pedrotti, M. F.; Silva, J. S.; Barin, J. S.; Nóbrega, J. A.; Flores, E. M. M. Microwave-assisted digestion methods: towards greener approaches for plasma-based analytical techniques. *Journal of the Analytical Atomic Spectrometry*, 32 (2017) 1448-1466.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

COMENTAR OUTROS ASPECTOS RELEVANTES DO DESENVOLVIMENTO GERAL DO INCT:

O objetivo geral do INCTAA é o de desenvolver as Ciências e Tecnologias Analíticas em nível nacional e internacional em seus aspectos mais avançados, educacionais e de divulgação do conhecimento, gerando soluções que atendam as demandas analíticas de caráter multidisciplinar, oriundos dos mais diversos setores da sociedade, quer sejam eles públicos ou privados. Em nível nacional o INCTAA se propõe a empregar sua expertise na solução de problemas analíticos demandados pelos mais diversos setores da sociedade. O reconhecimento destes problemas e sua solução efetiva é facilitado, dentro do instituto, devido à presença de representantes destes setores. Em nível internacional, o INCTAA compete em nível do estado da arte na produção acadêmica em áreas como Espectroscopia Atômica e Molecular (incluindo LIBS, espectroscopia NIR e espectroscopia THz), Forense, Ambiental, Instrumentação Analítica e Quimiometria, permitindo que seus objetivos produzam resultados significativos, veiculados nos melhores periódicos da área.

O presente relatório refere-se a o período de atuação do INCTAA em sua fase II, entre 01/JULHO/2017 — 30/JUNHO/2018. Neste período, os pesquisadores do INCTAA redefiniram seus objetivos específicos de forma a adequá-los aos cortes orçamentários e liberações irregulares e insuficientes de recursos pelo CNPq, bem como a decisões restritivas da CAPES relativas a utilização da sua cota de bolsas de mestrado, doutorado e pós-doutorado.











Sendo o INCTAA atual a continuidade da sua fase I, muitos resultados de ações iniciadas na fase anterior ainda puderam ser concretizados no período e estão sendo apresentados neste relatório. Estes resultados demonstram que os pesquisadores do instituto em sua atuação em rede estão cumprindo seus objetivos gerais de forma plenamente satisfatória. Porém, o impacto dos cortes e políticas de contingenciamento de recursos deverá impactar negativamente o próximo ano de execução da proposta INCTAA.

Espera-se que as políticas de financiamento da pesquisa voltem a se normalizar o mais rapidamente possível para que não haja um comprometimento irreversível de um esforço de 08 anos dedicados ao desenvolvimento de uma rede de pesquisadores nacionais produtiva e de excelência na área da Química Analítica.

LOCAL E DATA: Campinas, 30 de junho de 2016.

ASSINATURA: /

,











ANEXO I – INDICADORES DE PESQUISA ENSINO E DIVULGAÇÃO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA

Período: 01/JULHO/2017 - 30/JUNHO/2018

TESES E DISSERTAÇÕES

DISSERTAÇÕES DE MESTRADO CONCLUÍDAS

- 1. Andre Luiz Alves. Dissertação de mestrado: Seleção de variáveis empregando o algoritmo ransac. 2017. Pontifícia Universidade Católica de Goiás, Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de Goiás. Orientador: Clarimar José Coelho.
- 2. Arquimedes José Moura e Silva Filho. Dissertação de Mestrado: Investigação eletroquímica e determinação voltamétrica do fármaco mebendazol usando eletrodo de carbono vítreo. UFPB, João Pessoa-PB. Orientador: Mario Cesar Ugulino de Araujo.
- 3. Carlos Monteiro de Lima. Dissertação de Mestrado: Classificação de vinhos produzidos no vale do são Francisco baseada em imagens digitais e quimiometria. UFPB, João Pessoa-PB. Orientador: Mario Cesar Ugulino de Araujo.
- 4. Cibeli Lira Costa. Dissertação de Mestrado. Caracterização, preparo de amostras e definição de método para determinação de fosfato em fertilizante mineral de liberação lenta. 2017. PPGQ-UFSCar, São Carlos-SP. Orientador: Ana Rita de Araujo Nogueira.
- 5. Cláudia Jéssica da S. Cavalcanti. Dissertação de mestrado: Simulação e otimização da produção de etanol anidro combustíveL. Mestrado em Engenharia Química, UFPE, Recife-PE. Orientadora: Maria Fernanda Pimentel.
- 6. Flaviana Justino Rolim Severo. Dissertação de Mestrado: Eletrodo de pasta de carbono modificado com ftalocianina de cobalto para determinação de carbendazim em laranjas. UFPB, João Pessoa-PB. Orientadora: Kátia Messias Bichinho.
- 7. Glaucia Ferreira de Lima. Dissertação de Mestrado: Avaliação de leite esterilizado quanto ao teor de lactose utilizando infravermelho próximo e análise multivariada - UFRPE, Recife-PE. Co-Orientador: Fernanda Araújo Honorato.
- 8. Marcilon Fonseca de Lima. Dissertação de mestrado: Classificação multivariada para o diagnóstico de mastite bovina subclinica empregando ressonância magnética nuclear. 2017.











Pontifícia Universidade Católica de Goiás, Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de Goiás. Orientador: Clarimar José Coelho.

- 9. Marden Eugênio de Oliveira Silva. Dissertação de Mestrado: Extração em ponto nuvem para determinação de benzo(a)pireno em água por espectrometria de fluorescência molecular. UFPB, João Pessoa-PB. Orientadora: Kátia Messias Bichinho.
- 10. Matheus de Holanda Costa. Dissertação de Mestrado: Extração em fase sólida magnética de cobre em vinhos empregando funcionalização em nanopartículas magnéticas de Fe3O4. UFPB, João Pessoa-PB. Orientador: Mario Cesar Ugulino de Araujo.
- 11. Samara Soares. Dissertação de Mestrado: Desenvolvimento de procedimentos analíticos rápidos para o controle de qualidade de biodiesel. CENA-USP, Piracicaba-SP. Orientador: Fábio R. P. Rocha.
- 12. Teresa Cristina da Silva Rezende. Dissertação de mestrado: Recuperação limpa de bismuto a partir de fontes secundárias utilizando sistema aquoso bifásico. UFV, Viçosa-MG. Orientadora: Maria do Carmo Hespanhol.
- 13. Tiago Wacheski. Dissertação de Mestrado: Amostradores o-DGT para determinação de contaminantes emergentes em matrizes Aquosas. Universidade Federal do Paraná, Curitiba-PR. Orientador: Marco Tadeu Grassi.
- 14. Valber Elias de Almeida. Dissertação de Mestrado: Algoritmo das projeções sucessivas associado ao Kernel-PLS para calibração multivariada não linear. UFPB, João Pessoa-PB. Orientador: Mario Cesar Ugulino de Araujo.
- 15. Vitor Lacerda Sanches. Estudo da Bioacessibilidade e Biodisponibilidade de Elementos Metálicos em Leite e em Bebidas à Base de Soja. UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Solange Cadore.

TESES DE DOUTORADO CONCLUÍDAS

 Adenilton Camilo da Silva. Análise discriminante linear em duas dimensões para classificação de dados químicos de segunda ordem. UFPB, João Pessoa-PB. Orientador: Mario Cesar Ugulino de Araujo.











- 2. Alexandra Mary Gonçalves. Tese de Doutorado. Desenvolvimento de procedimentos para a síntese e caracterização química de catalisadores e de biodiesel. 2017. PPGQ-UFSCar, São Carlos-SP. Orientador: Ana Rita de Araujo Noqueira.
- 3. Carina F. Nascimento. Tese de Doutorado: Desenvolvimento de procedimentos analíticos explorando microextração líquido-líquido em fluxo para a determinação de espécies de interesse em águas e leite. CENA-USP, Piracicaba-SP. Orientador: Fábio R. P. Rocha.
- 4. Carolina Santos Silva. Tese de doutorado: Espectroscopia no infravermelho para aplicações forenses: documentoscopia e identificação de sêmen em tecidos. Doutorado em Química, Doutorado em Química. UFPE, Recife-PE. Orientadora: Maria Fernanda Pimentel. Co-orientador: Ricardo Honorato.
- 5. Daniel Jackson Estevam da Costa. Tese de doutorado. Determinação voltamétrica de hidrocarbonetos policíclicos aromáticos e de aminas biogênicas em alimentos. UFPB, João Pessoa-PB. Orientador: Mario Cesar Ugulino de Araujo.
- 6. Emanuel Marques. Tese de doutorado: Métodos para avaliação da qualidade de frutas utilizando espectroscopia e imagem hiperespectral na região do infravermelho próximo. Doutorado em Química. UFPE, Recife-PE. Orientadora: Maria Fernanda Pimentel. Co-orientador: Sérgio. T de Freitas.
- 7. José Licarion Pinto Segundo Neto. Tese de Doutorado: Uma nova abordagem para resolver deficiência de posto, desalinhamento de pico e interferências na análise de aminas biogênicas em peixes usando HPLC-DAD. UFPB, João Pessoa-PB. Orientador: Mario Cesar Ugulino de Araujo.
- 8. Juan Carlos Quintão. Tese de Doutorado: Sistema aquoso bifásico: obtenção de novos sistemas, partição e determinação de cloranfenicol. UFV, Viçosa-MG. Orientadora: Maria do Carmo Hespanhol.
- 9. Rafael da Silva Fernandes. Tese de Doutorado: Polímeros molecularmente impressos (MIP) com estrutura caroço-casca para extração de ácido ascórbico, cafeína e vanilina. UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Ivo M. Raimundo Jr.
- 10. Raquel Cardoso Machado. Tese de Doutorado. Potencialidades das técnicas com fonte de plasma e da espectrometria de absorção atômica em forno de grafite de alta resolução com fonte contínua para análise de fertilizantes. 2018. PPGQ-UFSCar, São Carlos-SP, Brasil e Universidade de Zaragoza, Zaragoza-Espanha. Orientador: Ana Rita de Araujo Nogueira.











- 11. Renato Allan Navarro Andrade. Tese de Doutorado: Um analisador quimiluminescente em fluxo-batelada baseado em filmes digitais com extração em fase sólida magnética aplicado a determinação de cobre em cachaças. UFPB, João Pessoa-PB. Orientador: Mario Cesar Ugulino de Araujo.
- 12. Thiago de Alencar Neves. Tese de Doutorado: Instrumentação e aplicação analítica da espectroscopia NIR e MIR na quantificação de gases causadores do efeito estufa. Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP. Orientador: Jarbas José Rodrigues Rohwedder.
- 13. Thiago Rosa Sampaio. Tese de Doutorado: Ocorrência e comportamento de contaminantes emergentes nas águas do Distrito Federal: aspectos espaciais, sazonais, naturais e antrópicos. Universidade de Brasília, Brasília-DF. Orientador: Fernando Fabriz Sodré.
- 14. Valeria Visani. Tese de Doutorado: Teor de óleo de alho em cápsulas gelatinosas por espectroscopia no infravermelho médio e técnicas quimiométricas UFPB, João Pessoa-PB. Orientador: Mario Cesar Ugulino de Araujo. Co-Orientador: Fernanda Araújo Honorato.

ARTIGOS

Artigos publicados

- Amais, R. S.; Rocha, F. R. P.; Nóbrega, J. A. Background signals in instrumental analysis: an essential discussion in undergraduate courses. *Química Nova*, 40 (2017) 228-227. DOI: 10.21577/0100-4042.20160183.
- Annunciação, D. L. R.; Almeida, F. V.; Hara, E.; Grassi, M. T.; Sodré, F. F. Éteres difenílicos polibromados (pbde) como contaminantes persistentes: ocorrência, comportamento no ambiente e estratégias analíticas. Química Nova, (2018). DOI (10.21577/0100-4042.20170218)
- Annunciação, D. L. R.; Almeida, F. V.; Sodré, F. F. Method development and validation for the determination of polybrominated diphenyl ether congeners in Brazilian aquatic sediments. *Microchemical Journal*, 133 (2017) 43-48. DOI (10.1016/j.microc.2017.03.009)
- 4. Benedito, L.E.C.; Maldaner, A.O.; Oliveira, A. L. An external reference ¹H qNMR method (PULCON) for characterization of high purity cocaine seizures. *Analytical Methods*, 10 (2018) 489-495.
- Bianchi, S. R.; Amaral, C. D. B.; Silva, C. S.; Nogueira, A. R. A. Determination of Selenium in Bovine Semen by ICP-MS Using Formic Acid for Sample Preparation. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 28 (2017) 2357-2364. Doi: http://dx.doi.org/10.21577/0103-5053.20170089.
- 6. Bizzi, C. A.; Pedrotti, M. F.; Silva, J. S.; Barin, J. S.; Nóbrega, J. A.; Flores, E. M. M.











- Microwave-assisted digestion methods: towards greener approaches for plasma-based analytical techniques. *Journal of the Analytical Atomic Spectrometry*, 32 (2017) 1448-1466. [Nota: envolve parceria com o INCT Bioanalítica]
- 7. Brasil, M. A. S.; An Automated Multicommuted Flow Analysis Procedure for Photometric Determination of Reducing Sugars in Wine Employing a Directly Heated Flow-Batch Device. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 28 (2017) 2013-2020.
- 8. Braz, C. E. M.; Jacinto, M. A. C.; Pereira-Filho, E. R.; Souza, G. B.; Nogueira, A. R. A. Potential of near-infrared spectroscopy for quality evaluation of cattle leather. *Spectrochimica Acta Part A-Molecular and Biomolecular Spectroscopy,* 202 (2018), 182-186. DOI: http://dx.doi.org/10.1016/j.saa.2018.05.025.
- Brito, L. R. E.; Martins, A. R.; Braz, A.; Chaves, A. B.; Braga, J. W. B.; Pimentel, M. F. Critical review and trends in forensic investigations of crossing ink lines. *TRAC-Trends in Analytical Chemistry*, 94 (2017) 54-69.
- Carvallho, P. S.; Custodio, J. M. F.; Vaz, W. F.; Cirilo, C. C.; Cidade, A. F.; Aquino, Gilberto,
 L. B.; Campos, D. M. B.; Cravo, P.; Coelho, C. J.; Oliveira, S. S.; Camargo, A. J.;
 Napolitano, H. B. Conformation analysis of a novel fluorinated chalcone. Journal of
 Molecular Modeling (Print) jcr, 23 (2017) 659-666.
- 11. Codo, C.R.B.; Caldas, J.P.; Peixoto, R.R.A.; Sanches, V.L.; Guirardelo, T.C.; Cadore, S.; Marba, S.T.M. "Electrolyte and Mineral Composition of Term Donor Human Milk Before and After Pasteurization and Raw Milk of Preterm Mothers. *Revista Paulista de Pediatria*, 36(2) (2018) 1-7. http://dx.doi.org/10.1590/1984-0462/;2018,36;2;00015
- Costa, W.K.O.C.; Silva, C.S.; Figueiredo, J.F.D.; Nóbrega, J.A.; Paim, A.P.S. Direct analysis
 of deodorants for determination of metals by inductively coupled plasma optical emission
 spectrometry. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*,155 (2018) 247–252
 https://doi.org/10.1016/j.jpba.2018.04.004
- 13. da Silva V.O.; Honorato, R.S.; Honorato, F. A.; Pereira, C. F. Classification of Brazilian and foreign gasolines adulterated with alcohol using infrared spectroscopy. *Forensic Science International*, 286 (2018), 121-127.
- 14. De Almeida, V. E.; Gomes, A. G.; Fernandes, D. D. S.; Goicoechea, H. C.; <u>Galvão, R. K. H.</u>; Araujo, Mario Cesar Ugulino. Vis-NIR spectrometric determination of Brix and sucrose in sugar production samples using kernel partial least squares with interval selection based on the successive projections algorithm. *Talanta*, 181 (2018) 38-43.
- De Oliveira, A. D.; De Sá, A. F.; Pimentel, M. F.; Pacheco, J. G. A.; Pereira, C. F.; Larrechi, M. S. Comprehensive near infrared study of Jatropha oil esterification with ethanol for biodiesel production. Spectrochimica Acta. Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 170 (2017), 56-64. DOI: https://doi.org/10.1016/j.saa.2016.07.006
- 16. do Nascimento da Silva, Cidade, M.; Heerdt, G.; Ribessi, R.L.; Morgon, N.H.; Cadore, S. Effect of Selenite and Selenate Application on Mineral Composition of Lettuce Plants Cultivated Under Hydroponic Conditions: Nutritional Balance Overview Using a Multifaceted











- Study. Journal of the Brazilian Chemical Society, <u>29(2) (2018) 371-379 doi: 10.21577/0103-5053.20170150</u>
- 17. do Nascimento da Silva, E.; Aureli, F.; D'amato, M.; Raggi, A.; Cadore, S.; Cubadda, F. Selenium Bioaccessibility and Speciation in Selenium-Enriched Lettuce: Investigation Of the Selenocompounds Liberated After *In Vitro* Simulated Human Digestion using Two-dimensional HPLC-ICP-MS. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 65 (2017) 3031-3038. *DOI*: 10.1021/acs.jafc.7b0118874.
- 18. do Nascimento da Silva, E.; Farias, L.O.; Cadore, S. The Total Concentration and Bioaccessible Fraction of Nutrients in Purées, Instant Cereals and Infant Formulas by ICP OES: a Study of Dietary Recommended Intakes and the Importance of using a Standardized in vitro Digestion Method. *Journal of Food Composition and Analysis*, 68 (2018), 65-72. DOI.org/10.1016/j.ifca.2017.06.007
- Fernandes, R. S.; DINC, M.; Raimundo Jr., I. M.; Mizaikoff, B. Synthesis and characterization of porous surface molecularly imprinted silica microsphere for selective extraction of ascorbic acid. *Microporous and Mesoporous Materials* 264 (2018) 28-34.
- Ferreira, G. M. D.; Ferreira, G. M. D.; Hespanhol, M. C.; Rezende, J. P.; dos Santos, A. C. P.; Gurgel, L. V. A.; da Silva, L. H. M. Adsorption of red azo dyes on multi-walled carbon nanotubes and activated carbon: A thermodynamic study. Colloids and Surfaces A-Physicochemical and Engineering Aspects, 529 (2017) 531 540. 10.1016/j.colsurfa.2017.06.021
- 21. Ferreira, G. M. D.; Ferreira, G. M. D.; Hespanhol, M.C.; Rezende, J. P.; Pires, A. C. S.; Ortega, P. F. R.; da Silva, L. H. M. A simple and inexpensive thermal optic nanosensor formed by triblock copolymer and polydiacetylene mixture. *Food Chemistry*, 241 (2018) 258 363. 10.1016/j.foodchem.2017.08.115
- 22. França, L. M.; Amigo, J. M.; Cairós, C.; Bautista, M.; Pimentel, M. F.. Evaluation and assessment of homogeneity in images. Part 1: Unique homogeneity percentage for binary images. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 171 (2017) 26-39.
- Gonçalves, A. M.; Lima-Corrêa, R. A. B.; Assaf, J. M.; Nogueira, A. R. A. Lithium and calcium based perovskite type oxides for ethylic transesterification. *Catalysis Today* (Print), 279 (2017), 177-186. DOI: http://dx.doi.org/10.1016/j.cattod.2016.06.018.
- 24. Gonzaga, F. B.; Braga Jr., L. R.; Sampaio, A. P.; Martins, T. S.; Oliveira, C. G.; Pacheco, R. M. S. A simple method for forward variable selection and calibration: evaluation for compact and low-cost laser-induced breakdown spectroscopy system. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 409 (2017) 3017-3024.
- 25. Honorato, F. A.; Lima, G. F.; Andrade, S. A. C.; Silva, V. H. Multivariate Classification of UHT Milk as to the Presence of Lactose Using Benchtop and Portable NIR Spectrometers. *Food Analytical Methods* DOI: 10.1007/s12161-018-1253-7.
- 26. Honorato, F. A.; Visani, V.; Honorato, R. S.; Araújo, M. C. U.; Netto, J. M. S. "Screening analysis of garlic-oil capsules by infrared spectroscopy and chemometrics". *Microchemical Journal* 133 (2017), 480-484. DOI: 10.1016/j.microc.2017.04.011











- 27. Lima, M. J. A.; Reis, B. F. Fully automated photometric titration procedure employing a multicommuted flow analysis setup for acidity determination in fruit juice, vinegar, and wine. *Microchemical Journal*, 135 (2017) 207-212.
- Lourenço, A. S.; Nascimento, R. F.; Silva, A. C.; Ribeiro, W. F.; Araujo, M. C. U.; Oliveira, S. C. B.; Nascimento, V. B. Voltammetric determination of tartaric acid in wines by electrocatalytic oxidation on a cobalt(II)-phthalocyanine-modified electrode associated with multiway calibration. *Analytica Chimica Acta*, 1008 (2018) 29-37.
- 29. Magalhães, T. S.; Reis, B. A Sensitive Photometric Procedure for Cobalt Determination in Water Employing a Compact Multicommuted. *Flow Analysis System*, 71 (2017) 2154-2163.
- 30. Magalhães, T. S.; Reis, B. F. A novel multicommuted flow analysis strategy for the spectrophotometric determination of cadmium in water at mg L⁻¹ levels without using a preconcentration step. *Analytical methods*, 10 (2018) 900.
- 31. Marra, M. C.; Costa, B. M. C.; Munoz, R. A. A.; Santana, M. H. P.; Maldaner, A. O.; Botelho, E. D.; Coltro, W. K. T.; Richter, E. M. "Fast determination of cocaine and some common adulterants in seized cocaine samples by capillary electrophoresis with capacitively coupled contactless conductivity detection". *Analytical Methods*, 10 (2018) 2875-2880.
- 32. Martins de P. L. C.; <u>Soares, A. da S.</u>; Soares, T. W.; Pereira, A. E.; Coelho, C. J. Modern Metaheuristic with Multi-Objective Formulation for the Variable Selection Problem. Journal Of Computer Sciences, 13 (2017) 659-666.
- 33. Milani, R.F.; Morgano, M.A.; Cadore, S. Trace Elements in Ready to Drink Beverages: a Simple, Fast and Reliable Method by ICP OES. Food Analytical Methods. 11 (2018) 1763– 1772DOI: 10.1007/s12161-018-1172-7
- 34. Montagner, C. C.; Vidal, C.; Acayaba, R. A.; Contaminantes emergentes em matrizes aquáticas do Brasil: cenário atual, aspectos analíticos, ecotoxicológicos e regulatórios. *Química Nova*, 40 (2017) 1094-1110. http://dx.doi.org/10.21577/0100-4042.20170091
- 35. Nascimento, C. F.; Rocha, F. R. P. Spectrofluorimetric determination of bisphenol A in tap waters by exploiting liquid-liquid microextraction in a sequential injection system. *Microchemical Journal*, 137 (2018) 429-434. DOI: 10.1016/j.microc.2017.12.006.
- 36. Oliveira, A. F.; Silva, C. S.; Bianchi, S. R.; Nogueira, A. R. A. The use of diluted formic acid in sample preparation for macro- and microelements determination in foodstuff samples using ICP OES. *Journal of Food Composition and Analysis*, 66 (2018) 7-12. DOI: http://dx.doi.org/10.1016/j.jfca.2017.11.001
- 37. Oliveira, V. S.; Honorato, R. S.; Honorato, F. A.; Pereira, C. F. Authenticity assessment of banknotes using portable near infrared spectrometer and chemometrics. *Forensic science international*, 286 (2018), 121-127. DOI: https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2018.03.001
- 38. Paiva, E. M.; Da Silva, V. H.; Poppi, R. J.; Pereira, C. F.; Rohwedder, J. J. R. Comparison of macro and micro Raman measurement for reliable quantitative analysis of pharmaceutical polymorphs. *Journal of pharmaceutical and biomedical analysis*, 157 (2018), 107-115. DOI: https://doi.org/10.1016/j.jpba.2018.05.010











- Pereira, C.C.; do Nascimento da Silva, E.; Souza, A.O.; Vieira, M.A.; Ribeiro, A.S.; Cadore, S. Evaluation of the Bioaccessibility of Minerals from Blackberries, Raspberries, Blueberries and Strawberries. *Journal of Food Composition and Analysis*, 68 (2018), 73-78. *Doi:* 10.1016/j.jfca.2016.12.001
- 40. Pereira, J. F. Q.; Silva, C. S.; Vieira, M. J. L.; Pimentel, M. F.; Braz, A.; Honorato, R. S. Evaluation and identification of blood stains with handheld NIR spectrometer. *Microchemical Journal*, 133 (2017) 561-566.
- 41. Rebouças, J.P; Rohwedder, J.J.R; Pasquini, C. Near infrared emission spectroscopy for rapid compositional analysis of Portland cements. Analytical Chimica Acta, 1024, (2018), 136-144.
- 42. Santos, K. M.; Santos, A. R.; Raimundo Jr., I. M.; Moreno-Bondi, M. C.; Orellana, G. Optimizing Cu(II) luminescent nanosensors by molecular engineering of the indicator dye and the encapsulation process. Sensors and Actuators B 255 (2018) 2367-2377.
- 43. Silva, Amanda C.; Lourenço, Anabel S.; Araujo, Mario Cesar Ugulino. Simultaneous voltammetric determination of four organic acids in fruit juices using multiway calibration. *Food Chemistry*, 266 (2018) 232-239.
- 44. <u>Silva, C. S.</u>; Pimentel, M. F.; Amigo, J. M.; <u>Honorato, R. S.</u>; <u>Pasquini, C.</u>. Detecting semen stains on fabrics using near infrared hyperspectral images and multivariate models. *TRAC-Trends in Analytical Chemistry*, 95 (2017) 23-35.
- 45. Silva, N. C.; Cavalcanti, C. J. S.; Honorato, F. A.; Rubio, J. M. A.; Pimentel, M. F. Standardization from a benchtop to a handheld NIR spectrometer using mathematically mixed NIR spectra to determine fuel quality parameters. *Analytica Chimica Acta*, 954 (2017) 32-42. DOI: 10.1016/j.aca.2016.12.018.
- 46. Silva, V. H.; Vieira, F. S.; Rohwedder, J. J. R.; Pasquini, C; Pereira, C. F. Multivariate quantification of mebendazole polymorphs by terahertz time domain spectroscopy (THz-TDS). *Analyst*, 142 (2017), 1519-1524.
- 47. Soares, S.; Lima, M. J. A.; Rocha, F. R. P. A spot test for iodine value determination in biodiesel based on digital images exploiting a smartphone. *Microchemical Journal*, 133 (2017) 195-199. DOI: 10.1016/j.microc.2017.03.029.
- 48. Soares, S.; Melchert, W. R.; Rocha, F. R. P. A flow-based procedure exploiting the lab-in-syringe approach for the determination of ester content in biodiesel and diesel/biodiesel blends. *Talanta*, 174 (2017) 556-561. DOI: 10.1016/j.talanta.2017.06.053.
- 49. Sodré, F. F.; Souza, G. B.; Feitosa, R. S.; Pereira, C. E. B.; Maldaner, A. O. Illicit Drugs, metabolites and adulterants in wastewater: monitoring community drug abuse in the Brazilian Federal District during the 2014 Soccer World Cup. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 28 (2017) 2146-2154. DOI (10.21577/0103-5053.20170063)
- 50. Sousa, E. S.; Pinto, L.; Araujo, M. C. U. A chemometric cleanup using multivariate curve resolution in liquid chromatography: Quantification of pesticide residues in vegetables. *Microchemical Journal*,134 (2017) 131-139.











- 51. Vannuci-Silva, M.; do Nascimento da Silva, E.; Artal, M.C.; Santos, A.; Silva, F.; Umbuzeiro, G.A.; Cadore, S. GFAAS and ICP-MS Determination of Ag and Cu in Haemolymph of a Millimetric-size Marine Crustacean (*Parhyale hawaiensis*) for Ecotoxicological Studies. *Atomic Spectrometry* 39(2) (2018) 67-74.
- 52. Veloso, A. C. G.; Patrício, P. R.; Quintão, J. C.; de Carvalho, R. M. M.; da Silva, L. H. M.; Hespanhol, M. C. Phase equilibrium of aqueous two-phase systems composed by L35 triblock copolymer;+ organic and inorganic ammonium electrolytes + water at 298.2 and 313.2 K. *Fluid Phase Equilibria*, 469 (2018) 26 32. 10.1016/j.fluid.2018.04.017
- Pasquini, C.; Near infrared spectroscopy: A mature analytical technique with new perspectives - A review. *Analytica Chimica Acta*,1026 (2018) 8-36. https://doi.org/10.1016/j.aca.2018.04.004
- 54. Simeone, M.L.F.; Parrella, R.A.C.; Schaffert, R.E.; Damasceno, C.M.B.; Leal, M.C.B.; Pasquini, C. Near infrared spectroscopy determination of sucrose, glucose and fructose in sweet sorghum juice. *Microchemical Journal*, 134(2017), 125-130.
- 55. VILLA, J.E.L.; Pasquini, C.; POPPI, R.J. Coupling of the ring-oven-based preconcentration technique and surface-enhanced Raman spectroscopy: Application for the determination of purine bases in DNA. *Analytica Chimica Acta*, 991(2017), 95-103. (interação com INCTBIO)

Artigos submetidos, aceitos ou no prelo

- Almeida, N. S.; Benedito, L. E. C.; Maldaner, A. O.; Oliveira, A. L. A Validated NMR Approach for MDMA Quantification in Ecstasy Tablets. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, no prelo. DOI: http://dx.doi.org/10.21577/0103-5053.20180071
- Costa, R.O.; Barcellos, P.S.; Canela, M. C. Removal of pesticide residues after simulated water treatment: by-products and acetylcholinesterase inhibition. *Eclética Química (Unesp. Araraquara. Impresso)*. Aceito para publicação em 10/06/2018, 2018.
- Hara, E.L.Y.; Silva, C.A.; Souza, R.S.; Colimo, A.G.S.C.; Grassi, M.T. Determination of Polybrominated Diphenyl Ethers in Riverine Sediments by Ultrasound-Assisted Microextraction (USAME), Reduced Scale Clen-up, and GC-MS. Current Analytical Chemistry, 2018. No prelo, online.
- 4. Moreira, R.C.; Costa, B. M. C.; Marra, M. C.; Santana, M.; Maldaner, A. O.; Botelho, E. D.; Paixão, T. R. L. C.; Richter, E. M.; Coltro, W. K. T. Screening of seized cocaine samples using electrophoresis microchips with integrated contactless conductivity detection. Electrophoresis, no prelo.
- Santos, S. G.; Schneider, J.; Rodrigues-Silva, C.; Tonetti, A. L.; Rath, S. Fluoroquinolones in hospital wastewater: analytical method, occurrence and residual antimicrobial activity. *Environmental Research. Artigo submetido*.











- 6. Tetzner, N. F; Rath, S. Veterinary antimicrobials and antiparasitic in fee-fishing ponds: analytical method and occurrence. *Environmental Pollution*. *Artigo submetido*.
- Galaverna, R.; Ribessi, R.L.; Rohwedder, J.J.R.; Pastre, J.C. Coupling Continuous Flow Microreactors to MicroNIR Spectroscopy: Ultra-Compact Device for the Facile In-line Reaction Monitoring. *Organic Process Research & Development*, no prelo., online em http://pubs.acs.org on June 20, 2018, DOI: 10.1021/acs.oprd.8b00060
- Sodré, F. F.; Feitosa, R. S.; Jardim, W. F.; Maldaner, A. O. Wastewater-based epidemiology of cocaine in the Brazilian Federal District: spatial distribution, weekly variation and sample preservation strategies. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, (2018). DOI (10.21577/0103-5053.20180105)
- Sodré, F. F.; Santana, J. S.; Sampaio, T. R.; Brandão, C. C. S. Seasonal and spatial distribution of caffeine, atrazine, atenolol and DEET in surface and drinking waters from the Brazilian Federal District. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, (2018). DOI (10.21577/0103-5053.20180061)
- Soares, S.; Rocha, F.R.P. Fast spectrophotometric determination of iodine value in biodiesel and vegetable oils. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, no prelo. DOI: 10.21577/0103-5053.20180044.

TRABALHOS APRESENTADOS EM CONGRESSOS NACIONAIS

- Acevedo, M. S. M. S. F.; Gama, M. R.; Rocha, F. R. P. On-column preconcentration of phenolic compounds by sequential injection chromatography. In: 41^a Reunião Annual da Sociedade Brasileira de Química, 2018, Foz do Iguaçu-PR, Brasil. (Apresentação: Oral).
- Annunciação, D. L. R.; Almeida, F. V.; Sodré, F. F. Éteres difenílicos polibromados (PBDE) em sedimentos do Lago Paranoá (DF). In: VIII Encontro Nacional de Química Ambiental, 2017, Curitiba-PR, Brasil. (Apresentação: Pôster)
- 3. Barcellos, P.S.; CANELA, M. C. Destino Abiótico da Atrazina em Solução Aquosa de Ácidos Húmicos Durante o Verão Tropical In: XVI Encontro Regional da Sociedade Brasileira de Química, 2017, Rio de Janeiro-RJ. (apresentação Pôster e oral)
- 4. Batista, K.S.; Santos, E.B.G.N.; Pereira Júnior, L.; Korn, M. Precipitação Homogênea De Al(OH)₃ Assistida Por Micro-Ondas Para Separação De Metais Em Salmouras. In: 41^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2018, Foz do Iguaçu-PR, Brasil. (Apresentação: Painel).
- Braz, C. E. M.; Jacinto, M. A. C.; Nogueira, A. R. A.; Caracterização termogravimétrica de couros de ovinos curtidos ao cromo e ao tanino vegetal. 10^a Jornada Cientifica Embrapa-São Carlos, 2018, São Carlos-SP, Brasil (Apresentação: Pôster).
- Cavalcanti, C. M. P.; Sodré, F. F. Contaminantes emergentes nos principais mananciais utilizados no Distrito Federal. In: VIII Encontro Nacional de Química Ambiental, 2017, Curitiba-PR, Brasil. (Apresentação: Pôster)
- 7. Cavalcanti, C. M. P.; Sodré, F. F. Risk assessment of emerging contaminants in main water











- intakes used in Federal District, Brazil. In: XX Congresso Brasileiro de Toxicologia, 2017, Goiânia-GO, Brasil. (Apresentação: Pôster)
- Chagas, F. O.; Fontoura, B. M.; Vargas, S. J. R.; da Silva, L. H. M.; Hespanhol, M. C. Effect of macromolecule hydrophobicity on liquid-liquid equilibrium of aqueous two-phase system composed of (NH4)2S2O3 In: 41a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2018, Foz do Iguaçu – PR, Brasil. (pôster)
- Costa, R.O.; Barcellos, P.S.; Canela, M.C. Effects of chlorination on pesticides after drinking water treatment: residue analysis and acetylcholinesterase inhibition In: 41a. Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2018, Foz do Iguaçu, Brasil (apresentação Pôster)
- Costa, R.O.; Canela, M. C. Análise De Resíduos De Agrotóxicos Após O Tratamento Convencional De Água. In: XVI Encontro Regional da SBQ-Rio, 2017, Rio de Janeiro-RJ, Brasil. (apresentação Pôster)
- 11. Costa, R.O.; Canela, M. C. Avaliação da capacidade de remoção de resíduos de agrotóxicos após o tratamento convencional de água. In: VIII Encontro Nacional de Química Ambiental, 2017, Curitiba-PR, Brasil, p.340-347, (apresentação Poster e oral).
- 12. Costa, W.K.O.C.; Silva, C.S.; Figueiredo, J.F.D.; Nóbrega, J.A.; Paim, A.P.S. Fast determination of metals using direct analysis of deodorants by inductively coupled plasma optical emission spectrometry. In: 41^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2018, Foz do Iguaçu-PR, Brasil. (Apresentação: Pôster)
- 13. Feliciano, I. P.; Stranghetti, m. De P.; Primo, D. De DF; Fernandes, C. H.; Silva, A. S. Da; Valle, f.; Magen, H.; Souza, G. B. De; Bernardi, A. C. de C. Comparação dos fertilizantes polihalita e KCl na adubação da alfafa. In: Jornada Científica Da Embrapa São Carlos, 9, 2017, São Carlos, SP.
- 14. Fontoura, B. M.; Chagas, F. O.; Vargas, S. J. R.; da Silva, L. H. M.; Hespanhol, MARIA C. Effect of temperature on the liquid-liquid equilibrium of the ternary system water + pluronic10R5 + ammonium thiosulfate In: 41a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2018, Foz do Iguaçu PR, Brasil. (pôster)
- 15. Higuera, J. M.; Silva, A. B. S.; Nogueira, A. R. A. Uso do planejamento Doehlert no desenvolvimento de método para a otimização da decomposição de carcaça de ovinos. 10^a Jornada Cientifica Embrapa-São Carlos, 2018, São Carlos-SP, Brasil (Apresentação: Pôster).
- 16. Lima, E. F.; Cantusio-Neto, R.; Montagner, C. C. Determinação da capacidade de remoção de contaminantes emergentes em estação produtora de água de reuso que emprega o sistema de tratamento MBR. 48º Congresso Nacional de Saneamento da Assemae, 2018, Fortaleza, CE, Brasil. (Tipo de apresentação: oral).
- 17. Lima, M. J. A. L. Chemiluminescent flow system for the determination of complexation capacity in opacity solutions: an automatic procedure. In 41^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2018, Foz do Iguaçu – PR











- 18. Lima, M. J. A.; Nascimento, C. F.; Rocha, F.R.P. Medidas fotométricas em extrações líquido-líquido empregando imagens digitais com smartphone. In: 4º Congresso Analitica Latin America, 2017, São Paulo-SP, Brasil. (Apresentação: Pôster).
- 19. Marinho, O. R.; Lima, M. J. A., Reis, B. F. Desenvolvimento de uma cela de fluxo para detecção de quimiluminescência empregando fotodiodo com detector. In 41a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2018, Foz do Iguaçu – PR
- 20. Marques, E.J.N.; Biasoto, A.C.T.; Freitas, S.T.; Nassur, R.C.M.R.; Oliveira, W.P.; Medeiros, E. P. Determinação rápida de atributos sensoriais em vinhos tintos utilizando espectroscopia Vis/NIR e LS-SVM. In: Workshop de Quimiometria, 2017, Salvador, BA, Brasil. (Apresentação: oral).
- 21. Milani, R. F.; Mauri, A.; Morgano, M. A.; Cadore, S. Elementos-Traço em Sucos de Frutas: Teor Total e Avaliação da Fração Bioacessível. In: SLACA 2017, 2017, Campinas-SP, Brasil. (Apresentação: Painel).
- 22. Moraes, M. R.; Sanches, V. L.; do Nascimento da Silva, E.; Cadore, S. Evaluation of the Bioaccessible Fractions of Minerals in Infant Formula. In: SLACA 2017, 2017, Campinas-SP, Brasil. (Apresentação: Painel).
- 23. Namikuchi, E.A.; Gaspar, R.D.L.; Mazali, I.O.; Raimundo Jr., I.M. Luminomagnetic core-shell nanoparticles for detection of metal ions. In: 41a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2018, Foz do Iguaçu, Paraná. (oral)
- 24. Nóbrega, J. A. Reflexões e Aprendizagens sobre Espectrometria Atômica. In: 41ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2018, Foz do Iguaçu-PR, Brasil. (Apresentação: Conferência).
- 25. Nogueira, A. R. A. Reference Materials Needs, Development, and Applications. 5° Congresso Analítica, 2017, São Paulo-SP, Brasil (Apresentação: Palestra).
- 26. Portal, T. P.; Bila, D.M.; Gomes, G.; Canela, M. C. Avaliação da Presença de Compostos Orgânicos Emergentes (COE) em Águas Superficiais e Tratadas de Campos dos Goytacazes, RJ. In: XVI Encontro Regional da SBQ-Rio, 2017, Rio De Janeiro, Brasil. (apresentação Pôster)
- 27. Portal, T. P.; Gomes, G.; Bila, D.M.; Canela, M.C. Determinação de compostos emergentes e avaliação da estrogenicidade por meio do ensaio (YES) em águas brutas e tratadas da região de Campos dos Goytacazes, RJ. In: VIII Encontro Nacional de Química Ambiental, 2017, Curitiba-PR. (apresentação Pôster)
- 28. Sá I. P.; Martinho, M. A. D., Nogueira, A. R. A. Especiação de Cr(VI) em fertilizante orgânico por meio de micro-extração líquido-líquido dispersiva. 5º Encontro Brasileiro sobre Especiação Química, 2017, Águas de Lindóia–SP, Brasil. (Apresentação: Pôster).
- 29. Sanches, V. L.; Peixoto, R. R. A.; Cadore, S. Estudo das Frações Bioacessíveis de Ca, Mg e Zn em Diferentes Metodologias. In: SLACA 2017, 2017, Campinas-SP, Brasil. (Apresentação: Painel).











- 30. Sampaio, T. R.; Sodré, F. F. Cafeína na água para consumo humano do DF: desenvolvimento, validação e aplicação de método empregando SPE-UPLC-MS/MS. In: I Encontro Regional da SBQ/CO, 2017, Pirenópolis-GO, Brasil. (Apresentação: Pôster)
- 31. Silva, A. B. S.; Nogueira, A. R. A., Estratégias para a quantificação de carbono residual em amostras de alimentos por MIP OES. 10^a Jornada Cientifica Embrapa-São Carlos, 2018, São Carlos-SP, Brasil (Apresentação: Pôster).
- 32. Soares, S.; Nascimento, C. F.; Rocha, F. R. P. Wetting film liquid-liquid microextraction in a sequential injection system for spectrofluorimetric determination of bisphenol A in tap waters. In: 41ª Reunião Annual da Sociedade Brasileira de Química, 2018, Foz do Iguaçu-PR, Brasil. (Apresentação: Pôster).
- 33. Soares, T. S.; Chagas, F. O.; Patricio, P. R.; Maldaner, A. O.; da Silva, L. H. M.; Hespanhol, M. C. Polydiacetylene/triblock copolymer nanosensor for the detection of lidocaine in the presence of cocaine adulterants In: 41a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2018, Foz do Iguaçu PR, Brasil. (oral)
- **34.** Vieira, C. J.; Windmoller, C. C.; Rodrigues, D.G.; Orlando, M. R. Bixin incorporated over a porous membrane as a biosorbent to remove mercury (II) from aqueous matrices. In 41a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2018, Foz do Iguaçu PR, Brasil (Apresentação: Pôster e Oral).

TRABALHOS APRESENTADOS EM CONGRESSOS INTERNACIONAIS

- Bernardi, A. C. C.; Souza, G. B.; Valle, F.; Magen, H. Comparing polyhalite and KCI in alfalfa fertilization. In: International Plant Nutrition Colloquium, 18, 2017, Copenhagen, Denmark. Proceedings. Copenhagen, Denmark: IPNC, 2017. p. 305-306.
- Braz, C. E. M.; Nogueira, A. R. A.; Jacinto, M. A. C.; Souza, G. B. Proposition of classification models by near-infrared spectroscopy for quality evaluation of cattle leathers.
 In: CSI XL Colloquium Spectroscopicum Internationale, 2017, CSI-XL-IX EMSLIBS Book of Abstracts, 2017. v. 1. Pisa, Italia (Apresentação: Pôster)
- 3. Cadore, S.; Milani, R. F.; Morgano, M. A. Trace Elements in Tea Soft Dinks: Total Content and Soluble Fraction. In: Euroanalysis 19, 2017, Estocolmo, Suécia. (Apresentação: Painel).
- 4. do Nascimento da Silva, E.; Santos, F. N.; Eberlin, M. N.; Cadore, S. Evaluation of the "cocoa honey" as a Rich Source of Minerals to be Consumed in natura and/or to Add Nutritional Value to Drinks and Foods. In: EuroFoodChem XIX, 2017, Budapeste, Hungria. (Apresentação: Painel).
- 5. Domingos, M.; Sanchez B.C.; Canela, M. C. New autonomous and cheaper Solar Disc for Water Pasteurization In: 10th European meeting on Solar Chemistry and Photocatalysis: Environmental Applications (SPEA10), 2018, Almeria, Espanha. (apresentação Pôster)
- 6. Fernandes, R.S.; Raimundo Jr., I.M.; Custódio, R.; Mizaikoff, B. Computational approach for











- development of surfasse molecularly imprinted silica nanospheres for caffeine. In: XIV European Conference on Optical Chemical Sensors and Biosensors, 2018, Nápoles, Itália. (pôster).
- Galvão Filho, A. R.; Soares, A. da Silva; Coelho, C. J.; Lima, T. W. A Stochastic Approach of SIRC Model Using Individual-Based Epidemiological Models. In: Proceedings of the Portuguese Conference on Artificial Intelligence - Lecture Notes on Computer Science, 2017, Coimbra. Portuguese conference on artificial intelligence (EPIA). Coimbra, 10423 (2017) 778-788.
- Gaspar, R.D.L.; Ferraz, S.M.M.; Fortes, P.R.; Sigoli, F.A.; Raimundo Jr., I.M. Oxygen sensor bsed on terbium(III) carboxylate complex covalently coupled to different silicone matrixes.
 In: XIV European Conference on Optical Chemical Sensors and Biosensors, 2018, Nápoles, Itália. (pôster).
- 9. Lima, G. F.; Honorato, F. A.; Silva, V. H.; Andrade, S. A. C. Classification Of Regular And Lactose Free UHT Milk Using Portable Near-Infrared (NIR). In: 18th International Conference on Near Infrared Spectroscopy ICNIRS, Copenhague Dinamarca (pôster).
- 10.Machado, R. C.; Aramendia, M.; Nogueira, A. R. A.; Resano, M. Determination of As in complex samples using sampling high-resolution continuum source graphite furnace atomic absorption spectroscopy. In: In: CSI XL Colloquium Spectroscopicum Internationale, 2017. CSI-XL-IX EMSLIBS Book of Abstracts, 2017. v. 1. Pisa, Italia (Apresentação: Pôster)
- 11.Namikuchi, E.A.; Gaspar, R.D.L.; Mazali, I.O.; Raimundo Jr., I.M. Effect of the diameter of magnetic core on the luminescent properties of Fe₃O₄@SiO₂@RhB@SiO₂ nanosensor. In: XIV European Conference on Optical Chemical Sensors and Biosensors, 2018, Nápoles, Itália. (pôster).
- 12.Nóbrega, J. A.; Fialho, L. L.; Mello, M. L.; Pirola, C. Sub-Boiling Distillation: Recycle and Reuse of Nitric Acid. In: 2018 Winter Conference on Plasma Spectrochemistry, 2018, Amelia Island-FL, Estados Unidos (Apresentação: Painel)
- 13.Oliveira, V. S.; Honorato, R. S.; Honorato, F. A.; Pereira, C. F. Authenticity assessment of Brazilian real banknotes using portable Near Infrared Spectrometer and Chemometrics. In: 18th International Conference on Near Infrared Spectroscopy, 2017, Copenhagen, Dinamarca. Pôster.
- 14.Paula, L. C. M.; Lima, T. W.; Coelho, C. J.; Soares, A. da S. Variable Selection as a Non-Completely Decomposable Problem: A Case Study in Multivariate Calibration. In: Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conferenc Berlin (2017).
- 15. Silva, A. B. S.; Pereira Filho, E.R.; Nogueira, A. R. A. . Direct determination of TiO₂ as Ti used as digestibility marker in bovine faeces by laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS). In: In: CSI XL Colloquium Spectroscopicum Internationale, 2017. CSI-XL-IX EMSLIBS Book of Abstracts, 2017. v. 1. Pisa, Italia (Apresentação: Pôster)
- 16. Soares, S.; Melchert, W. R.; Rocha, F. R. P. A flow-based procedure exploiting the lab-in-syringe approach for the determination of ester content in biodiesel and diesel/biodiesel blends. In: 46th World Chemistry Congress (IUPAC), 2017. (Apresentação: Pôster).











17. Vargas, S. J. R.; Acaccio, T. V. J.; da Silva, L. H. M.; Hespanhol, M.C. Separação de terras raras leves e pesadas usando sistema aquoso bifásico formado por cloreto de 1-etilmetilimidazolio + K₂CO₃ + água In: I Simpósio Ibero-americano sobre sistemas aquosos bifásicos, 2018, Aracaju – SE, Brasil (oral).

OUTRAS ATIVIDADES VOLTADAS AO ENSINO E DIVULGAÇÃO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA

Eventos organizados, material didático produzido, ações para o ensino de qualquer nível.

 Curso em Espectroscopia no Infravermelho Próximo e Técnicas de Modelamento Multivariado

Data da realização: 14 a 16 de maio de 2018.

Local: Embrapa Pecuária Sudeste - São Carlos - SP

Carga horária: 20 horas

Palestrante: Dr. Celio Pasquini

Organizadores: Gilberto Batista de Souza (Embrapa Pecuária Sudeste), Ana Rita de Araújo Nogueira (Embrapa Pecuária Sudeste) e Maria Lúcia Ferreira Simeone (Embrapa Milho e Sorgo.

Público-alvo: Institutos de pesquisa, Universidades, laboratórios prestadores de serviços de análise de alimentos e fábricas de ração.

Objetivos: Capacitar os usuários da técnica NIRS em desenvolvimento de modelos de calibração multivariada para uso na avaliação da qualidade de alimentos.

Número de participantes: 48 participantes

- 9º Workshop Ensaio de proficiência para laboratórios de nutrição animal (EPLNA) 17-18/maio/2018. Embrapa Pecuária Sudeste, São Carlos-SP, Brasil.
- 3. Canela, M.C. O contaminante nosso de cada dia, Mesa redonda, Pint of Science, 2018. https://pintofscience.com.br/events/campos, Campos dos Goytacazes-RJ, Brasil.
- Coelho, C. J. Organizador: II Jornada Científica da Escola de Ciências Exatas e da Computação 2017.
- 5. Sodré, F. F. Organização, em andamento, do 19º Encontro Nacional de Química Analítica (ENQA).
- Sodré, F. F. Ação de divulgação científica: Post publicado na página Campus Online do Facebook. https://www.facebook.com/onlinecampus/posts/1648138265282150

PALESTRAS, SEMINÁRIOS E CONFERÊNCIAS

 Cadore, S. A Importância e a Beleza da Química na Vida de Todos Nós, 06/11/2017, Colégio Santana (2º Grau), Antonio Prado, RS











- Cadore, S. Pesquisa e Publicações Científicas: Ética no Ambiente Acadêmico. ITAL/Campinas, Campinas, SP, 18/09/17
- Cadore, S. Como Avaliar a Contribuição dos Minerais na Dieta Alimentar? Semana de Química, UFRR, Boa Vista, RR, Brasil, 16/11/2017
- Freitas, S.T. Equipamento com infravermelho permite análise pós-colheita sem danos à manga. Jornal do Semiárido, n.48, Petrolina, PE, p. 7-7, 01 dez. 2016.
- Freitas, S.T. Manejo, beneficiamento e indicadores de qualidade em mangas para exportação. Desafios na produção, mercado e a expansão do cultivo de manga no Vale do São Francisco. Embrapa Semiárido/Serviço Nacional de Aprendizagem Rural (SENAR). Palestra, 2018.
- Freitas, S.T. Tecnologias para o monitoramento da maturação e qualidade de frutos de forma não destrutiva. 2017. I Seminário de Atualização Tecnológica em Fruticultura. Embrapa Semiárido/Serviço Nacional de Aprendizagem Rural (SENAR). Palestra, 2017.
- Grassi, M.T. Determination of labile metallic species in natural waters using diffusive gradients in thin-film (DGT) devices modified with montmorillonite and vermiculite. Seminário apresentado em visita técnica à Universidad de Caldas, Manizales, Colômbia, em 5/10/2017.
- Grassi, M.T. Você conhece a composição da água que bebe? In: Encontro Paranaense de Estudantes de Química. Guarapuava-PR, Brasil. Seminário proferido em 28/7/2017.
- Montagner, C. C. Mini-curso. Contaminantes emergentes: dinâmica e toxicidade. I Escola de Química Ambiental (IEQA 2018) da UNESP (2018), São José do Rio Preto, SP. Brasil. (4 horas)
- 10. Nogueira, A. R. A. A Química Analítica no Contexto da Agropecuária. Universidade Estadual da Bahia. 31 de julho de 2017, Salvador-BA, Brasil (Apresentação: Palestra).
- 11. Nogueira, A. R. A. Determinação de contaminantes inorgânicos em alimentos e fertilizantes. I Simpósio de Integração da Pós-graduação. Universidade Federal de Viçosa, Campus Rio Paranaíba, 2017, Rio Paranaíba-MG (Apresentação: Palestra).
- 12. Nogueira, A. R. A., Análises para contaminantes inorgânicos. I Workshop de Nutrição Animal, 2017, LANAGRO Pedro Leopoldo-MG (Apresentação: Palestra).
- Raimundo Jr. I.M.; LIBS como ferramenta analítica no estudo de fontes hidrotermais oceânicas. In: 41a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2018, Foz do Iguaçu, Paraná. (oral)
- Rocha, F. R. P. Flow Analysis: Looking back and forward. Invited lecture.
 In: 46th World Chemistry Congress (IUPAC-2017), 2017, São Paulo-SP, Brasil.
- Rocha, F. R. P. Novas alternativas para a detecção de adulterações em leite. In: 4º
 Congresso Analitica Latin America, 2017, São Paulo-SP, Brasil.
- 16. Souza, G. B. Análises Bromatológicas Produtos Vegetais I Workshop de Nutrição Animal, 2017, LANAGRO Pedro Leopoldo-MG (Apresentação: Palestra).
- Souza, G. B. Ferramentas estatísticas de aplicação no laboratório. I Workshop de Nutrição Animal, 2017, LANAGRO Pedro Leopoldo-MG (Apresentação: Palestra).











CAPÍTULOS DE LIVRO

- Marques, E. J. N.; Freitas, S.T.; Neto, A.F.; Cavalcante, I.H.L. . Espectroscopia na região do infravermelho próximo (NIR): técnica analítica não destrutiva para determinação da qualidade de manga. In: Neto, A.F.; Almeida; F.A.C.; Cavalcante, I.H.L.. (Org.). Manga: Maturação, colheita e conservação. 1ed.Juazeiro, BA: UNIVASF, 2017, v. 1, p. 60-87.
- 2. Souza, G, B.; Nogueira, A. R. A.; Olivares, I. R. B.; Vieira, O. V. Programas de Ensaio de Proficiência. 2017. In. Compêndio Brasileiro de Alimentação Animal. Sindirações, 2017.
- Souza, G. B.; Fujieda, R. J. Y. Avaliação da Repetibilidade e Reprodutibilidade de Métodos de Proteína Bruta: Estudo Colaborativo. In. Compêndio Brasileiro de Alimentação Animal. Sindirações, 2017.

PRÊMIO

Peixoto, R. A. e Cadore, S. MCTIC DE MÉTODOS ALTERNATIVOS À EXPERIMENTAÇÃO ANIMAL. 1º lugar na Categoria Produção Acadêmica com o trabalho "Métodos de Bioacessibilidade In vitro e o Uso de Células CACO 2 em Estudos In vitro de Biodisponibilidade", resultado da tese de doutorado de Rafaella Regina Alves Peixoto - UNICAMP, Campinas-SP. Orientador: Solange Cadore 2017.