INSTITUTOS NACIONAIS DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA – INCT

ACOMPANHAMENTO E AVALIAÇÃO

Período de abrangência do relatório: de Março de 2012 a Março de 2013

IDENTIFICAÇÃO DO PROJETO

TÍTULO: Instituto Nacional de Ciências e Tecnologias Analíticas Avançadas

PROCESSO Nº: FAPESP: 2008/57808-1 **CNPq:** 573894/2008-6

COORDENADOR: Celio Pasquini

PROJETO DE PESQUISA

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

Neste período, os pesquisadores INCTAA foram contemplados com um projeto temático financiado pela FAPESP sobre espectroscopia THz no domíno do tempo (THz-TD), coordenado pelo Prof. Celio Pasquini (coordenador do INCTAA) e, por meio de remanejamento de recursos também da FAPESP, oriundos do INCTAA, com um instrumento de imagem hiperespectral que opera na região do infravermelho próximo (NIR).

Estes dois fatos, causaram um acréscimo significativo nos temas de pesquisa do grupo de pesquisadores do INCTAA, que passaram a dispor de duas ferramentas analíticas complexas e no estado-da-arte. Desta forma, diversos projetos relacionados à espectroscopia THz-TD e Imagem Hiperespectral NIR passaram a ser desenvolvidos durante o período a que se refere este relatório.

Novos objetivos foram gerados em consequência da inserção destes temas de pesquisa. Dentre eles destacam-se:

1. **Novos objetivos associados ao tema de imagens hiperespectrais NIR**:

1.1 Uso de imagem hiperespectral NIR em análises forenses de assinaturas.

1.2 Uso de imagens hiperespectrais NIR e técnica de “ring-oven” na determinação de aditivos em gasolina.

1.3 Uso de imagens hiperespectrais NIR no estudo de fármacos.

1.4 Uso de imagens hiperespectrais NIR na classificação de sementes oleaginosas

Estes temas envolvem a participação de 5 pesquisadores do INCTAA.

2. **Novos objetivos associados ao tema THZ-TD**:

2.1 Desenvolvimento de espectrômetro THz baseado em “fóton-mixer” de lasers de estado sólido.

2.2 Estudo de fenômenos de cristalização de materiais de interesse biológico e farmacêutico.

2.3 Desenvolvimento de métodos baseados em espectroscopia THz-TD para determinação de gases.

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

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

Em caso positivo indicar quais foram:

EQUIPE

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

Em caso positivo indique o número de inclusões e exclusões:

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

Pesquisador ( ) Inclusão ( ) Exclusão

Nota: listar em anexo, o nome e CPF, dos pesquisadores incluídos e excluídos do INCT.

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, que pode ser acessado no endereço: (http://www.inctaa.com.br/index.asp). Porém, os mecanismos presenciais (reuniões, visitas e workshops) continuam sendo os mais efetivos para que os projetos em rede se desenvolvam, como manifestado e justificado nos relatórios

anterior.

Neste período, o Workshop anual que reúne os membros do INCTAA não foi realizado, pois deveremos organizar um evento de avaliação global do projeto ao final de 2013.

Os membros do INCTAA envolvidos nas suas diferentes linhas de ação continuam a promover **reuniões de trabalho presenciais de área e workshops dedicados a temas mais específicos**, considerados essenciais para que os projetos desenvolvidos em colaboração entre seus diversos grupos de pesquisa sejam conduzidos com objetividade e dentro dos seus cronogramas. Em adição, os workshops, por serem abertos ao público, são efetivos na disseminação do conhecimento. O Grupo de Química Ambiental do INCTAA, cuja ação envolve instituições espalhadas por todo o país, planeja realizar um Workshop específico no final do mês de Junho de 2013, para realizar uma avaliação final dos resultados das campanhas de monitoramento dos contaminantes emergentes em águas servidas.

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.

A manutenção deste intercâmbio é essencial para a execução das propostas de pesquisa do INCTAA e para a formação dos próprios 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.

Esperamos que não haja nenhum empecilho para a utilização dos recursos alocados as rubricas referentes a transporte e diárias para pagamentos dos alunos orientados pelos pesquisadores do INCTAA e que se deslocam para a execução de tarefas pertinentes aos objetivos e divulgação dos resultados do projeto.

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

Não foram detectadas dificuldades no período.

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

EM CASO POSITIVO INDIQUE O NÚMERO:

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

Justificar:

Empresas ( ) Inclusão ( ) Exclusão

RESULTADOS OBTIDOS / METAS

COMENTE OS 3 (TRÊS) PRINCIPAIS RESULTADOS CIENTÍFICOS E/OU TECNOLÓGICOS OBTIDOS NO PERÍODO (03/2012 - 03/2013) PARA:

A – PESQUISA:

A1. Desenvolvimento de métodos espectroanalíticos aplicados à documentoscopia, bens culturais e alimentos.

Tese de Doutorado de Flávia de Souza Lins Borba na área de Química, defendida em 2012 na Universidade Federal de Pernambuco, orientada e co-orientada por pesquisadores do INCTAA. Orientador: Maria Fernanda Pimentel Avelar (UFPE). Co-orientador: Ricardo Honorato (Polícia Federal).

O caráter multidisciplinar do INCTAA é evidenciado e exemplificado destacando-se o trabalho da aluna Flávia de Souza Lins Borba, que envolveu o desenvolvimento de métodos analíticos não destrutivos, empregando técnicas quimiométricas, aplicados à documentoscopia e à arqueometria.

O primeiro trabalho trata do desenvolvimento de um método analítico não-destrutivo para discriminar tintas de canetas azuis do tipo gel, esferográfica e rollerball utilizando a espectroscopia no infravermelho médio. Foram construídos dois modelos de classificação utilizando a técnica quimiométrica de análise discriminante linear sendo um com as classes compostas pelo tipo e o outro pelas marcas das tintas. Foi obtida 100% de classificação correta em todos os conjuntos de teste, exceto quando se utilizou uma marca de papel reciclado nos registros, cujo percentual de classificação correta obtida foi 91,3%. Esse trabalho é de interesse direto da Polícia Federal tendo sido co-orientado pelo Perito Ricardo Honorato, também membro do INCTAA.

Outro método desenvolvido pela aluna empregou a espectroscopia de emissão em plasma induzido por laser (LIBS) para analisar tijolos antigos e dois fragmentos de pinturas rupestres pertencentes a dois sítios arqueológicos brasileiros, sendo um no estado do Piauí (Sítio Toca da Extrema II) e outro no estado do Rio Grande do Norte (Sítio aqueológico Xique-xique). Devido à complexidade dos espectros, a análise de componentes principais foi empregada para explorar os conjuntos de dados. Os tijolos foram discriminados pelos seus teores de Ti, Zr, Sr e Fe. Com relação às pinturas rupestres, foi demonstrado que a utilização de técnicas multivariadas é indispensável devido à grande complexidade dos espectros obtidos durante estudo de profundidade das amostras arqueológicas. O trabalho foi realizado em colaboração com o Instituto Nacional de Arqueologia, Paleontologia e Ambiente do Semiárido – INAPAS (www.inapas.com.br).

As seguintes publicações são resultantes da tese da aluna:

Silva, C. S.; Borba, F. S. L. ; Pimentel, M.F.; Pontes, M.J.C.; Honorato, R.S., Pasquini, C. "Classification of blue pen ink using infrared spectroscopy and linear discriminant analysis". *MicrochemicalJournal* , 109 (2013) 122-127.

Borba, F. S. L.; Cortez, J.; Asfora, V. K.; Pasquini, C.; **Pimentel, M. F.**; Pessis, A.; Khoury, H. "Multivariate treatment of LIBS data of prehistoric paintings*". Journal of the Brazilian Chemical Society*". 23 (2012), 958 – 965.

A2. Emprego da Espectroscopia NIR e de RMN ^{1}H de Baixo Campo no Monitoramento da Reação de Transesterificação para Produção de Biodiesel. Determinação de Parâmetros de Qualidade de Diesel por RMN ^{1}H de Baixo Campo.

Tese de Doutorado em Química defendida em Abril de 2013 na Universidade Estadual de Campinas, orientada por pesquisador do INCTAA. Orientador: Jarbas José Rodrigues Rohwedder.

Neste trabalho foram desenvolvidos novos métodos analíticos, empregando espectroscopia **NIR** e de **RMN ^{1}H**, para o monitoramento *On-line* da reação de transesterificação de óleos vegetais para a produção de biodiesel e determinação de parâmetros de qualidade de diesel combustível através da espectroscopia de **RMN ^{1}H**.

Empregando a espectroscopia **NIR** foi utilizada pela primeira vez a região espectral compreendida entre 5928 e 5959 cm^{-1} para a determinação *On-Line*, através de um modelo de calibração multivariado, as taxas de conversões dos triglicerídeos provenientes de óleo de soja em ésteres de ácidos graxos (biodiesel). A aplicação do modelo desenvolvido foi avaliada no monitoramento de duas reações de transesterificação conduzidas a 20 ± 0,2 ^{o}C e 55 ± 0,2 ^{o}C que apresentaram erros médios de previsão para um conjunto de validação de 0,60 e 1,02% de conversão, respectivamente.

De maneira similar foram desenvolvidos outros 3 métodos analíticos empregando um espectrômetro portátil de **RMN ^{1}H** de baixo campo para a determinação das taxas de conversão dos triglicerídeos provenientes do óleo de semente colza em ésteres metílicos de ácidos graxos. O primeiro método utiliza as áreas dos picos dos prótons metoxílicos dos ésteres de ácidos graxos e dos prótons etilênicos da cadeia de ácidos graxos para a determinação direta das taxas de conversão dos triglicerídeos. Um segundo método utiliza um modelo de calibração **PLS** para a determinação das taxas de conversão e o terceiro método emprega os desvios químicos dos prótons hidroxílicos do metanol e glicerol presentes na fase oleica para a correlação com as taxas de conversão dos triglicerídeos em ésteres.

Outro importante resultado alcançado durante o desenvolvimento do trabalho foi o entendimento da partição das moléculas dos alcoóis (metanol e glicerol) entre as duas fases que constituem o meio reacional durante a reação de transesterificação. Este fato é importante para compreender melhor o mecanismo de reação de produção de biodiesel, uma vez que a taxa de reação depende da quantidade de metanol e catalisador dissolvidos inicialmente na fase oleica. A

possibilidade de identificar os valores da partição dos alcoóis ao final da reação possibilita também o desenvolvimento de técnicas de separação que permita otimizar a recuperação de biodiesel e metanol em uma planta de produção de biodiesel, refletindo diretamente na redução dos custos de processo.

Modelos de calibração **PLS** empregando espectros de RNM 1H também foram desenvolvidos para a determinação de diferentes parâmetros de qualidade de diesel combustível **B5**, como: Massa Específica, Curva de Destilação para 10%, 50%, 85% e 90% de recuperação, Número de cetano e Ponto de Fulgor, através da utilização dos espectros de **RMN ^{1}H** de baixo campo de amostras de diesel sem qualquer tipo de preparo de amostra ou utilização de padrão interno. Todos os modelos desenvolvidos apresentaram valores de erro inferiores às técnicas analíticas empregadas atualmente como referência pelas normas **ASTM** e **ABNT NBR**. A técnica de **RMN ^{1}H** de baixo campo foi empregada também para a determinação do Teor de Biodiesel nas amostras de diesel combustível, onde apresentou um erro relativo média de 2,5% em relação a técnica analítica de referência.

Esta tese de doutorado permitirá aos pesquisadores do INCTAA explorarem novas linhas de pesquisa viabilizadas pelo avanço da tecnologia dos equipamentos de bancada de ressonância magnética nuclear (RMN) baseados em imãs permanentes. Estes instrumentos apresentam baixo custo e permitem, com o uso das técnicas quimiométricas, contornar os problemas associados à baixa resolução e homogeneidade de campo inerentes a este tipo de instrumento. Recentemente, a FAPESP aprovou a compra de um equipamento de RMN de baixo campo que estará disponível ao grupo de pesquisadores do INCTAA para complementar ou expandir suas linhas de pesquisa.

As seguintes publicações resultaram da tese do aluno:

Killner, H.H.M.; Rohwedder, J.J.R.; Pasquini, C.; “A PLS regression model using NIR spectroscopy for on-line monitoring of the biodiesel production reaction”; *Fuel*, 90 (2011) 3268-3273.

Linck, Y.G., Killner, M.H.M.; Danieli, E.; Blümich, B.; “ Mobile low-field ^{1}H NMR spectroscopy desktop analysis of biodiesel production”; *Appl. Mag. Res*., 44 (2013) 41-53.

A3. **Compostos Emergentes em Águas Servidas**

O grupo de pesquisadores do INCTAA, que atende esta demanda de abrangência nacional, continuou, no período, realizando trabalhos voltados para a determinação da **qualidade da água tratada**, onde os resultados obtidos até o momento nas capitais brasileiras propõem a avaliação da relação qualidade manancial/água tratada, acusando particularidades de hábitos regionais, população e características de saneamento das cidades estudadas. Este trabalho está cumprindo o objetivo de esclarecer tanto para as autoridades públicas, quanto para a população, a necessidade de monitoração de determinados poluentes, como também alertar a população sobre a qualidade da água tratada que está

disponível para consumo humano. O grupo está organizando um workshop a ser realizado em 2013, para encerrar as atividades deste programa que se estende desde o início do INCTAA, produzindo resultados relevantes para a sociedade em geral.

Os resultados serão divulgados na forma de um livro, planejado para ser impresso no final de 2013, contendo todos os resultados, sua análise e consequências para o tratamento de águas servidas a população brasileira.

B – FORMAÇÃO DE RECURSOS HUMANOS:

B1. IV Workshop de Quimiometria.

O INCTAA colaborou efetivamente com a organização do IV Workshop de Quimiometria, que ocorreu entre os dias 23 e 26 de Abril de 2013 no município de Conde – PB. O evento foi coordenado pelo Prof. Wallace Fragoso, pesquisador da UFPB e membro do INCTAA. O workshop contou também com outros pesquisadores do INCTAA que ministraram palestras e/ou cursos difundindo a disciplina Quimiometria para cerca de 100 alunos de pós-graduação e graduação vindos de universidades brasileiras. Em particular, os Profs. Celio Pasquini e Maria Fernanda Pimentel, pesquisadores do INCTAA, ministraram o curso intitulado "Aspectos Práticos da Classificação e Calibração Multivariadas", que contou com 40 alunos inscritos.

B2. Treinamento de 40 pesquisadores participantes da Rede NIR EMBRAPA.

A Rede em Espectroscopia NIR da EMBRAPA realizou seu segundo Workshop em João Pessoa, PB, realizado no período de 10 a 14 de Setembro de 2012. O evento contou com a participação de 40 pesquisadores vindos de 25 unidades da EMBRAPA espalhadas pelo país e que participam da rede. Os pesquisadores do INCTAA, Celio Pasquini e Maria Fernanda Pimentel complementaram o treinamento dos participantes ministrando um curso intensivo de 40 horas em Métodos de Calibração Multivariada Aplicados a Espectroscopia NIR.

B3. Ética em Pesquisa

Este tema relevante para o momento atual da pesquisa nacional preocupa os membros do INCTAA. A Profa. Solange Cadore, do Instituto de Química/UNICAMP, pesquisadora do INCTAA, coletou diversas informações, fatos e ocorrências, e, aliando-os a conceitos sobre o tema, preparou um seminário que tem sido divulgado intensivamente por todo o Brasil, contribuindo para a formação de novos pesquisadores e para o alerta de outros. A qualidade e valor do seminário sobre Ética em Pesquisa, preparado e ministrado pela Profa. Cadore tem sido reconhecido por todos que o assistiram e é destacado neste relatório dentro das ações do INCTA voltadas para formação de recursos humanos. Abaixo se encontra a lista dos eventos e dos locais onde o tema foi abordado, no período referente a este relatório, com a participação da Profa. Cadore:

Seminários:

1. “É Possível Fazer Pesquisa com Qualidade e Ética?” UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 13/06/12.

2. “Pesquisa, Qualidade e Ética: Por Que Falar Sobre Isso?” UFPel, Pelotas, RS, 22/06/12

3. “Comportamento Ético em Pesquisa Científica”. UFJF, Juiz de Fora, MG, 17/08/12

4. “Pesquisa com Ética e Qualidade – É possível” UNIFAL, Alfenas, MG, 31/08/12

5. “Ética na Pesquisa”. UFGD, Dourados, MT, 22/11/12

6. “Ética na Pesquisa”. UFPA, Belém, PA, 04/03/13

7. “Pesquisa com Ética”, USP-SP, São Paulo, SP, 14/03/2013

8. “O Desafio de Fazer Pesquisa com Ética”. PUC-RIO, Rio de Janeiro, RJ, 18/03/13

Palestra:

1. “O Desafio de Fazer Pesquisa com Ética”. IV Bionatural e III Workshop de Química de Microorganismos , Belém, PA, 10/04/13

Conferência de abertura:

1. “Comportamento Ético na Pesquisa”, Semana de Química, UNEB, Salvador, BA, 11/09/12

Mesas redondas:

1. “Ética na Pesquisa” Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 24/10/12

2. “Ética” IQ/Unesp – Araraquara, 09/11/12

3. “Ética na Pesquisa” UFABC, 23/11/12

4. “O Químico que o Brasil Precisa” XXXIII Escola de Verão em Química, UFSCar, 08/02/13

C – TRANSFERÊNCIA DE CONHECIMENTO E TECNOLOGIA:

C1. Rede NIR da Empresa Brasileira de Pesquisas Agrícolas (EMBRAPA).

O **INCTAA é parceiro da EMBRAPA** neste projeto e está transferindo o conhecimento detido pelos seus pesquisadores nas áreas de Espectroscopia NIR, Quimiometria e Instrumentação Analítica para treinar e implantar a Rede em Espectroscopia NIR.

A importância da tecnologia NIR para a área agrícola é reconhecida mundialmente e o Brasil encontra-se atrasado em relação a países como os Estados Unidos, Canadá, França, Bélgica e Austrália, para citar somente alguns, em relação a ações em rede que permitem a plena utilização dos seus benefícios. A constituição da rede EMBRAPA significa, portanto, um avanço de alta relevância para o país e para seu setor agrícola que passou a contar com uma ferramenta poderosa de controle de qualidade de produtos agro-pecuários, de auxílio à seleção de espécies de plantas mais adequadas ao clima e solo de plantio e de aumento de produtividade. Antecipa-se um impacto muito grande no uso da tecnologia NIR em diversas áreas estratégicas para a economia do país.

No período ao qual se refere este relatório, dois pesquisadores do INCTAA (Prof. Celio Pasquini do IQ/UNICAMP e Profa. Maria Fernanda Pimentel do DEQ/UFPE) ministraram um treinamento intensivo em Quimometria durante o II Workshop da Rede NIR da EMBRAPA. O Workshop ocorreu em João Pessoa – PB no período de 10 a 14 de Setembro de 2012 e contou com a participação de 40 pesquisadores da rede, oriundos de unidades da EMBRAPA distribuídas de Norte a Sul do Brasil.

C2 – Licenciamento de Patente:

As medidas polarimétricas são utilizadas intensivamente na indústria farmacêutica e nas usinas de **produção de bio-etanol e de açúcar**. No caso das usinas, as medidas polarimétricas (rotação óptica) são responsáveis diretamente pelo controle de qualidade da matéria prima da usina, monitorando o teor de sacarose no caldo de cana-de-açúcar.

Um novo princípio de obtenção de medidas de rotação óptica de substâncias opticamente ativas foi desenvolvido no Instituto de Química da UNICAMP, resultante das atividades do INCTAA.

Este novo princípio gerou um instrumento construído e avaliado como parte da tese de doutorado da aluna Lívia Paulia Dias orientada pelo Prof. Celio Pasquini, dentro da linha de Instrumentação Analítica do INCTAA. A patente de invenção foi solicitada junto ao INPI tendo o protocolo o número: BR10 2012 010741 4.

Esta tecnologia foi licenciada para a empresa ENCIBARELA por meio de contrato promovido pela agência de inovação da UNICAMP (INOVA), com a interveniência da FUNCAMP em 02 de Dezembro de 2012. A ECIMBARELA pretende iniciar a comercialização do instrumento no final de 2013.

Desta forma, completou-se o ciclo de inovação desde a sua idealização pelos pesquisadores do INCTAA, sua avaliação na forma de protótipo de laboratório, sua patente, conseguida com auxílio da INOVA – UNICAMP, e o licenciamento que permitirá que a tecnologia seja disponibilizada à sociedade.

Ressalta-se que embora este projeto tenha um viés fortemente tecnológico ele serviu de tema para o Doutorado da aluna Lívia Paulia Dias defendida em 2012 e originou a publicação:

RIBEIRO, L. P. D.; ROHWEDDER, J. J. R.; PASQUINI, C. . A new approach to polarimetric measurements based on birefringent crystals and diode lasers. Analytica Chimica Acta, 771, 1-6, 2013.

Este artigo foi escolhido pelos editores da Analytica Chimica Acta (uma das melhores da área da Química Analítica) como “featured article”, servindo de capa para a edição do fascículo da revista no qual ele foi publicado. Desta forma, este projeto cumpriu de forma exemplar os objetivos do INCTAA.

C3 – Trabalhos desenvolvidos com a participação dos pesquisadores da Polícia Federal, membros do INCTAA: Gasolinas Estrangeiras

Tendo em vista o formato do INCTAA e seu mecanismo de atuação, que elege demandas reais por tecnologia analítica provenientes de instituições públicas e privadas, como a Polícia Federal e a BRASKEM, a transferência do conhecimento gerado pelos projetos desenvolvidos é imediata, como exemplificado abaixo.

A entrada ilegal de gasolina automotiva de origem estrangeira em território brasileiro é um problema que causa preocupação às autoridades brasileiras responsáveis por esse tipo de fiscalização. Acontece com maior frequência nas fronteiras com alguns países como Peru, Paraguai, Bolívia e, principalmente, Venezuela. A principal causa desse problema é devido à diferença de preços da gasolina praticado no Brasil comparado a estes países.

Por conter etanol, a gasolina brasileira pode ser facilmente distinguida das outras a partir do método de referência para determinação de teor de álcool etílico anidro combustível (AEAC), estabelecido pela norma ABNT NBR 13992. No entanto, de acordo com a Polícia Federal, o etanol tem sido adicionado intencionalmente em gasolinas estrangeiras apreendidas. Logo, a identificação rápida dessas gasolinas se torna mais complexa. Desta forma, torna-se necessário desenvolver um método analítico simples, robusto, não destrutivo e rápido, utilizando a espectroscopia no infravermelho médio e técnicas quimiométricas para classificar gasolinas automotivas como pertencente ao Brasil e a Venezuela.

O método desenvolvido pelos pesquisadores do INCTAA, Maria Fernanda Pimentel, Fernanda Honorato e Ricardo Honorato, utilizando a técnica multivariada de classificação PLS-DA juntamente com a espectroscopia na região do infravermelho médio conseguiu classificar, de maneira eficiente, as gasolinas analisadas, atingindo 100% de classificação correta conforme pode ser observado na figura abaixo:

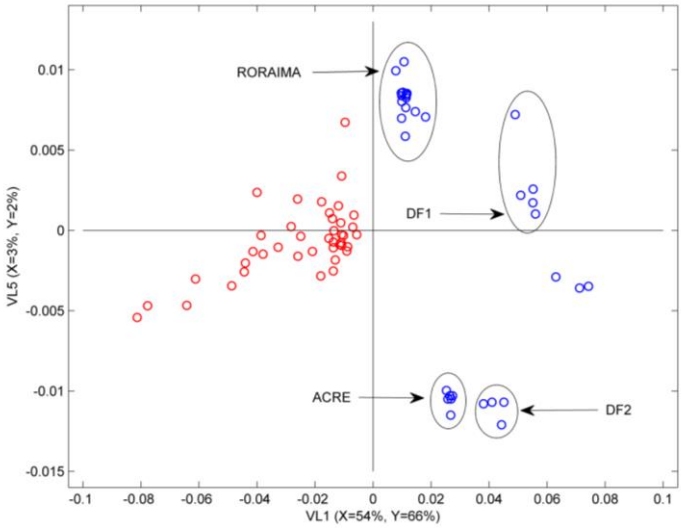


Figura C3.1. Gráfico dos escores (VL1 vs. VL5) para o modelo PLS-DA construído com todas as variáveis (Vermelha: Venezuela, Azul: Brasil).

Dessa forma, os resultados obtidos foram bastante satisfatórios. Para dar continuidade ao trabalho, pretende-se:

- Testar outros métodos quimiométricos para classificar as gasolinas por nacionalidade, como a Modelagem Independente e Flexível por Analogia de Classe (SIMCA).
- Melhorar a representatividade do conjunto de dados, adquirindo amostras de países como Peru e Bolívia, para fazer a classificação também entre as gasolinas estrangeiras.
- Testar outros tipos de pré-processamentos.
- Realizar uma transferência de calibração entre os espectrômetros MIR da Polícia Federal localizados no SEPLAB em Brasília e nos SETEC's do Acre e Roraima.

Este trabalho foi desenvolvido pelo aluno Neirivaldo Cavalcante da Silva sendo

parte da sua dissertação de mestrado, cuja defesa se deu em 30/04/2013 no Departamento de Química Fundamental da UFPE sob a orientação da Profa. Maria Fernanda Pimentel, pesquisadora do INCTAA.

D – EDUCAÇÃO E DIVULGAÇÃO DA CIÊNCIA:

D1. Nova Disciplina de Pós-Graduação em Tratamento de Dados de Imagens

Essa disciplina de 60 horas foi oferecida pela primeira vez no programa de pós-graduação em Química da UFPE, sob a responsabilidade da Profa. Maria Fernanda Pimentel, pesquisadora do INCTAA. Sua ementa e objetivos decorreram da realização do curso em Tratamento Multivariado de Imagens, oferecido em Janeiro de 2012 (com apoio do INCTAA), pelos professores Alberto Ferrer (UPV-Espanha), José Manuel Pratts (UPV-Espanha) e Anna de Juan (Universidade de Barcelona, Espanha).

D2. Atividades promovidas pelo INCTAA <u>em nível de graduação e ensino médio</u> no período de 03/2012 – 03/2013.

D2.1. IV Semana de Química da UAST – Promovida com a colaboração do Instituto e organização da Profa. Dra. Andréia e Edvaldo Nóbrega Gaião , pesquisadores do INCTAA.

- Período do evento: 05 a 09 de novembro de 2012
- Tema: Decompondo e recompondo a química
- Alunos de graduação da UAST: 260
- Alunos de outras instituições: 5
- Alunos do ensino médio que visitaram a UAST: 300 alunos (de vários municípios do Sertão do Pajeu)
- Palestrantes: 33 professores (4 do NUQAAPE)
- Monitores: 40
- Alunos envolvidos nos trabalhos de ensino, pesquisa e extensão: 53
- Organizadores: 10 (professores, 2 do INCTAA) e 6 (alunos do curso de licenciatura em química)
- 03 Oficinas
- 10 Minicursos (3 voltados para área de química analítica)
- 15 palestras (3 voltadas para área de química analítica)
- 01 Mesa redonda
- 01 Momento de Colóquios
- 23 apresentações de trabalhos orais (envolvendo ensino, pesquisa e extensão)
- Momento cultural (apresentação de Xaxado)

- **Instrumentação Analítica para o Ensino de Química**

Para a divulgação da química analítica na região da UAST, foi ministrado um curso de eletrônica básica pelo Prof. Edvaldo Nóbrega Gaião, pesquisador do INCTAA, a fim de promover um entendimento sobre circuitos e componentes eletrônicos que possam ser utilizados no desenvolvimento de instrumentos ou acessórios para auxiliar no ensino da química. O minicurso foi criado com duração de seis horas que oferecer noções básicas e montagem de circuitos e placas eletrônicas além de criação de um pequeno fotômetro a base de *LED* e fotodiodo, capaz de realizar medidas de absorbância de soluções.

Além do fotômetro, outros instrumentos também foram desenvolvidos durante o período do projeto com eletrônica simples, estes equipamentos que foram utilizados em eventos para auxiliar no entendimento de alguns conceitos químicos, como os de condutividade elétrica por soluções. Uma foto do curso oferecido e dois indicadores de condutividade desenvolvidos e utilizados durante o projeto podem ser visto na Figura D2.1.

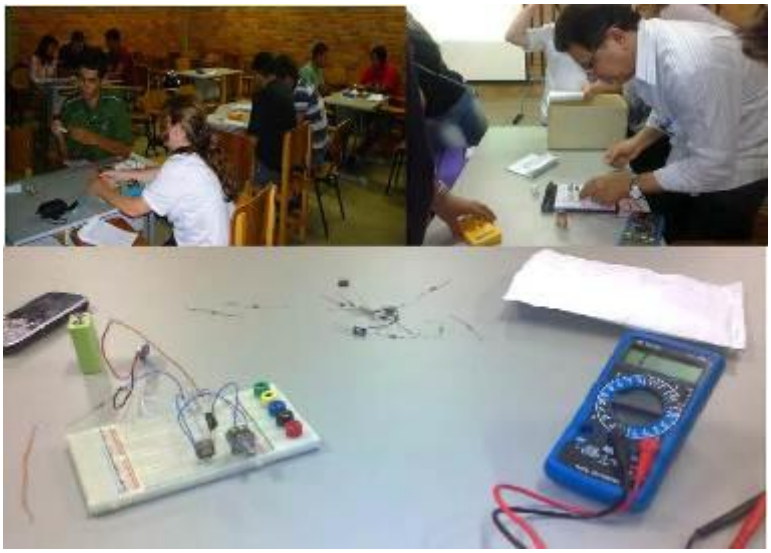


Figura D2.1- Imagem do processo de montagem de instrumentação e minicurso oferecido.

-Construção dos equipamentos

- Indicador de condutividade com base em um circuito eletrônico

Com base no planejamento foi construído um instrumento, Figura D2.2, capaz de identificar a presença de íons em solução, quando este emite luz numa faixa de intensidade antecipadamente calibrada.

Figura D2.2: Indicador de condutividade com circuito eletrônico.

O processo de construção foi realizado utilizando os seguintes dispositivos eletrônicos, equipamentos e materiais necessários: placa de fenolite 6x6cm; 3 *LED's* (indicadores luminosos); 1 amplificador operacional TL084 (Circuito

Integrado – CI); 3 potenciômetros de 100 kΩ; 8 resistores (4 de 100 kΩ, 3 de 1 kΩ e 1 de 5 kΩ); 1 bateria de 9V; 2 bastões de grafite retirados de pilhas alcalinas; 80 cm de cabo micro TR 1,0x0,50mm^2; caixa plástica de 10x5x6 cm; cera durapoxi; tinta spray; 50cm de fios; lápis piloto sem uso; conector de bateria; conector (plug) RCA de aparelho DVD;

A calibração, Figura D2.3, foi realizada com soluções de Cloreto de Sódio (NaCl) com três diferentes concentrações do sal. Cada LED (começando da direita para a esquerda com relação ao aparelho) foi ajustado por meio dos potenciômetros para emitir luminosidade numa faixa de condutividade (Tabela 1) verificada em um condutivímetro comercial da marca Lutron CD – 4303 de modo que cada solução apresentava maior condutividade na medida que continham mais sal dissolvido.

Figura D2.3: Esquema do processo de calibração do comparador de condutividade

No indicador ou comparador de condutividade (nome dado ao equipamento) foi observado o acendimento do LED entre uma faixa e não em um ponto fixo de condutividade, sendo é claro a quantidade de sal dissolvido a influenciadora da passagem de corrente. A Tabela 1 mostra as faixas de acendimento dos LEDs de acordo com a condutividade.

Tabela 1. Resultado da calibração do comparador de condutividade

Parâmetros (condutividade e número de LED´s acesos)	Condutividade medida com um condutivímetro comercial
Baixa – 1	de 0 mS a 5 mS.
Média – 2	de 5 mS a 10 mS.
Alta – 3	de 10 mS a 15 mS.

Verificada por meio de testes seu correto funcionamento, o circuito com seus dispositivos eletrônicos foram acondicionados dentro de uma caixa plástica, Figura D2.4, para garantir a integridade e preservação dos dispositivos. Para realçar ainda sua estética a caixa foi delicadamente pintada com a tinta spray cor preta de modo a fornecer-lhe um bom aspecto visual.

Figura D2.5: Circuito do indicador com os respectivos componentes do equipamento acondicionados.

O equipamento apresentado na figura D2.2 (à base de *LED´s)* possui uma sonda, Figura D2.5, que foi confeccionada utilizando o invólucro de um lápis piloto. De duas pilhas alcalinas foram retiradas o grafite (bastão de aproximadamente 6 cm) a serem utilizados como eletrodos da sonda. Cada bastão foi devidamente preso à ponta de uma das duas “pernas” de fio (50 cm), que passa pelo interior da sonda até a conexão com o circuito dentro da caixa. A extremidade da sonda foi vedada com cera epoxi de modo a não permitir a entrada de líquido da solução analisada.

Figura D2.5: Sonda do equipamento eletrônico.

(a)

(b)

Figura D2.6 – Alunos utilizando os equipamentos (a)Serra Talhada e (b) Santa Cruz da Baixa Verde

Depois de confeccionados os aparelhos foram levados para sala de aula com a finalidade de complementar de maneira ilustrativa os conceitos abordados pelos professores. Uma aula foi devidamente planejada e aplicada na sala com situações que contextualizavam a utilização dos mesmos, Figura D2.6. Além desta aula, os alunos utilizaram os equipamentos em uma apresentação para as outras turmas, os discentes usaram estas ferramentas explicando conceitos relacionados à condutividade, os alunos do curso de licenciatura em química realizaram um pequeno treinamento com os alunos que iriam fazer esta apresentação e estiveram presentes durante a mesma apenas para intervir em caso de problemas técnicos.

Os equipamentos desenvolvidos foram aplicados em sala de aula, ilustrando as aulas, antes somente teóricas, buscando cumprir sua função de estimular o aprendizado por parte dos alunos. A aplicação foi feita em duas escolas públicas do município de Serra Talhada e cidades circunvizinhas, instrumentando aulas de química.

Os equipamentos foram também utilizados em apresentações em feiras químicas, nas escolas e na Universidade.

Figura D2.10. Ação realizada para divulgar a química em comunidades carentes do município de serra talhada.

- Divulgação da química e do INCTAA em comunidades carentes da região

No dia 17 de dezembro de 2012, com o intuito de levar a química, não apenas para escolas das região, a última ação extra do ano de 2012, consistiu em fazer uma atividade onde apresentasse a química a sociedade como área de grande importância para o dia a dia das pessoas. Duas comunidades foram visitadas e realizadas as ações, que teve como tema: química e sustentabilidade, Figura 10.

Dentro da parte de recursos humanos do INCTAA, estamos divulgando a química, em particular a química analítica para a sociedade em geral na região do sertão do Pajeú.

D3. Artigo de Revisão

Rocha, D. L.; Batista, A. D.; Donati, G. L.; Nóbrega, J. A.; Rocha, F. R. P. "**Greening sample preparation in inorganic analysis**". *Trends in Analytical Chemistry*, 45 (2013) 79-92.

Trabalho de revisão oriundo de cooperação entre dois grupos de pesquisadores participantes do INCTAA (CENA e DQ-UFSCar) e que atuam na área da Química Verde, no qual são criticamente avaliadas e discutidas diversas alternativas mais limpas para a decomposição de amostras (uso de ácidos diluídos em decomposições assistidas por micro-ondas, decomposições com vapores de ácidos, microdigestões, combustão e processos fotocatalíticos) ou extração de analitos (fluido supercrítico, água pressurizada, ultrassom, micro-extrações líquido-líquido e em fase sólida, extração em ponto nuvem, sistemas aquosos bifásicos, extrações com líquidos iônicos e extrações assistidas por micro-ondas). A revisão demonstra a viabilidade e dissemina as alternativas mais limpas de preparo de amostras, que geram menos impacto ambiental, mantendo (ou mesmo melhorando) o desempenho analítico em relação às alternativas convencionais.

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 Modelos de Calibração Multivariada em Espectroscopia de Infravermelho Próximo para Amostras de Forrageiras. INCTAA – Química – UFSCar - Este resultado – apesar de ainda estar em desenvolvimento – constitui um avanço expressivo no uso da tecnologia da Espectroscopia no Infravermelho Próximo (NIRS) no Brasil. Trata-se ao mesmo tempo de formação de recursos humanos e da obtenção de resultados altamente promissores, com propostas de criação de modelos de regressão para plantas forrageiras tropicais (foi obtido o modelo para Brachiaria brizantha), com aplicação imediata pelos laboratórios que participam da rede NIRS-Embrapa; propostas inovadoras quanto ao auxílio a outras linhas de pesquisa no INCTAA, como na produção de materiais de referência (avaliação das propriedades e estudos de estabilidade de amostras utilizadas em ensaio de proficiência) e avaliações qualitativas (nutricionais) de plantas forrageiras, proposição que demonstrou ser tão eficiente quanto determinações quantitativas na avaliação da homogeneidade de material a ser preparado para distribuição em ensaio de proficiência. Além disso o fortalecimento de rede de colaboradores que se dedicam ao desenvolvimento de trabalhos em uma mesma linha de pesquisa certamente aumentará o impacto dos resultados obtidos.

A2. Desenvolvimento de dispositivo com tecnologia inovadora empregado em medidas polarimétricas de relevância para a produção de bioetanol e açúcar.

A3. Elaboração de diagnóstico de abrangência nacional da situação dos Contaminantes Emergentes em águas servidas no Brasil.

B – FORMAÇÃO DE RECURSOS HUMANOS:

B1. Abordagem do tema "Ética em Pesquisa" por meio de palestras e participações em eventos assistidos por mais de 1000 profissionais e alunos da área de pesquisa.

B2. Treinamento de 40 pesquisadores da EMBRAPA em Técnicas de Calibração Multivariada durante o 2º. Workshop da Rede NIR da EMBRAPA.

B3. Mini-curso ministrado para 40 alunos de pós-graduação e professores de todo o Brasil, durante o IV Workshop de Quimiometria realizado em Carapibús – PB.

C – TRANSFERÊNCIA DE CONHECIMENTO E TECNOLOGIA:

C1. Implantação da primeira Rede Brasileira em Espectroscopia NIR na EMBRAPA, assegurando a transferência de conhecimento e tecnologia detida pelos pesquisadores do INCTAA.

C2. Licenciamento da tecnologia patenteada de medida de rotações ópticas por

meio de polarímetro inovador.

C3. Desenvolvimento de método e sua transferência para a Polícia Federal para identificação de gasolinas contrabandeadas em regiões de fronteiras.

D – EDUCAÇÃO E DIVULGAÇÃO DA CIÊNCIA:

D1. Disseminação, por meio de entrevistas e reportagens na mídia não especializada, do conhecimento sobre tema dos Contaminantes Emergentes de interesse social atual.

D2. 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.

D3. Implantação de disciplina associada à temática do INCTAA, em nível de pós-graduação, no Departamento de Química da Universidade Federal de Pernambuco.

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 para a sociedade dos resultados alcançados pelo INCTAA continuam a ser aqueles já mencionados no relatório anterior:

Recuperando metais de lixo eletrônico de forma ambientalmente correta (Extração em sistemas bifásicos aquosos)

Os resultados obtidos pelo grupo de pesquisadores do INCTAA (Dra. Maria do Carmo Hespanhol da Silva e Dr. Luiz Henrique Mendes da Silva) da Universidade Federal de Viçosa apontam novas possibilidades para a recuperação de metais nobres e tóxicos (Ni, Cd, Co e Au) presentes em lixo eletrônico. O problema do lixo eletrônico é de interesse da sociedade em geral e vem se agravando à medida que a indústria eletroeletrônica expande sua produção o país e no mundo. O destino dos circuitos impressos e integrados descartados, muito deles com contendo os metais relacionados acima, e as baterias que os alimentam, passou a ser um motivo de preocupação ambiental. Propostas, como esta desenvolvida no âmbito do INCTAA, são relevantes para se atender a demanda por métodos de recuperação e reciclagem destes materiais classificados como limpos, por serem minimamente agressivos ao meio ambiente.

Melhorando a Qualidade e Evitando o Desperdício com a Química Analítica (Analisadores de Processo)

Uma indústria moderna para ser competitiva no contexto internacional opera de forma quase automática, empregando instrumentos que controlam os processos que geram seus produtos. Os instrumentos verificam a qualidade dos insumos e do produto final, evitando que este chegue ao consumidor final fora dos padrões de aceitação pelos órgãos de regulamentação oficiais.

Estes instrumentos são conhecidos com Analisadores de Processo e constituem um dos temas de pesquisa e desenvolvimento tecnológico do Instituto Nacional de Ciências e Tecnologias Analíticas Avançadas (INCTAA).

Por exemplo, um dos analisadores recentemente desenvolvido pelo INCTAA consegue avaliar a qualidade da gasolina em uma refinaria de petróleo no mesmo instante em que ela está sendo produzida. As vantagens de se poder fazer isto são enormes. A qualidade da gasolina que chega aos consumidores é assegurada, pois o sistema de controle da refinaria pode realizar correções durante a produção mantendo a qualidade do seu produto constante e adequada ao consumo.

A indústria, por sua vez, se beneficia destes analisadores obtendo uma maior produtividade e garantindo a sua competitividade, fornecendo produtos de menor preço e maior qualidade.

Indiretamente, o meio ambiente se vale do fato de que quando um produto com a qualidade assegurada é queimado nos motores dos veículos eles emitem menor quantidade de poluentes. Além disso, como se evita a produção de uma gasolina de má qualidade, que teria de ser re-processada pela indústria, menos energia é gasta, ajudando a minimizar o impacto da sua produção sobre o meio ambiente. A qualidade dos combustíveis também adota critérios que tem haver com a diminuição do impacto da sua queima ao meio ambiente.

Este exemplo de atividade do INCTAA está em acordo com a dinâmica do mundo atual, na qual a cadeia produtiva de um setor industrial se interliga de forma intensa com aspectos de forte interesse social, como a preservação do meio-ambiente e os direitos do consumidor.

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 u 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 PERÍODO (Anexar Referências – Ver Anexo AI.1 até AI.4):	
TIPO	**QUANTIDADE**
SOFTWARE	02
PATENTES	05
PRODUTOS	04
PROCESSOS	01
PRODUÇÃO ARTÍSTICA (ESPECIFICAR)	
OUTROS (ESPECIFICAR):	
ARTIGOS PUBLICADOS NO PERÍODO	42

B – INDICADORES DE TRANSFERÊNCIA DE CONHECIMENTO E TECNOLOGIA	
(Ver Anexo II):	
TIPO	**QUANTIDADE**
Parceria com a Rede Nacional de Espectroscopia NIR da EMBRAPA	01
Licenciamento de Patente	01
Transferência direta de resultados de pesquisa para a Polícia Federal	01

C – INDICADORES DE EDUCAÇÃO E DIVULGAÇÃO DA CIÊNCIA	
NÚMEROS DA PRODUÇÃO NO PERÍODO (Ver Anexo III):	
TIPO	**QUANTIDADE**
Cursos, Disciplinas e Treinamentos	06
Eventos Realizados	04
Teses de Doutorado	09
Dissertações de Mestrado	04
Palestras e Seminários Proferidos pelos Pesquisadores do INCTAA	32
Capítulos de Livros	02
Participação em Congressos (não especificados em anexo)	18 Nacionais + 26 Internacionais

INFORMAÇÕES ADICIONAIS

FORMAS DE DISPONIBILIZAÇÃO PÚBLICA DOS RESULTADOS DO PROJETO:

Cinco vídeos de divulgação dos principais resultados produzidos pelo INCTAA foram elaborados e podem ser acessados na página do instituto na web (http://www.inctaa.com.br/).

Participação em Seminários e Conferências: À convite, o coordenador e diversos membros do INCTAA têm participado de seminários e conferências nas

quais as atividades e resultados do INCTAA são divulgados.

Reportagens: de agências de financiamento de pesquisa e de veículos da mídia escrita e falada. Ver exemplos no Anexo IV.

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

Instalação da câmera de imagem hiperespectral e do espectrômetro THz-TD no Instituto de Química da UNICAMP.

Neste período foram instalados dois equipamentos de grande importância para as atividades de pesquisa do INCTAA. Um deles refere-se a um espectrômetro THz que opera no domínio do tempo. Este instrumento foi financiado pela FAPESP em decorrência de um projeto temático que envolve muitos pesquisadores do INCTAA. A espectroscopia realizada na faixa espectral de 0,2 a 6 THz começou a ser explorada apenas recentemente com a disponibilidade dos equipamentos como o instalado no IQ-UNICAMP. Este instrumento permitirá a implantação de uma nova linha de pesquisa que busca utilizar as informações decorrentes das transições de baixa energia (rotacionais ou vibracionais) para a análise de materiais e amostras de interesse.

O outro equipamento é uma Câmera Hiperespectral que opera na região do Infravermelho Próximo (NIR) de 1100 a 2500 nm. Esta câmera permite a obtenção de imagens hiperespectrais nas quais para cada pixel é obtido um espectro completo na região NIR. Este instrumento foi adquirido com recursos FAPESP oriundos do projeto INCTAA e abre novas perspectivas de trabalho para o grupo de pesquisadores do instituto. Diversos projetos de interesse forense e de monitoramento de qualidade de combustíveis, bem como de propriedades da borracha natural foram iniciados empregando este novo instrumento.

As duas linhas de pesquisa abertas neste período complementam as atividades do INCTAA e as estendem, tornando-as mais abrangentes e possibilitando a abordagem temas atuais de pesquisa na área da Química Analítica.

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

EM CASO POSITIVO COMENTAR:

A integração do INCTAA com outros INCTs tem sido promovida de forma gradual. Porém, como ocorrido no período anterior, deve-se reconhecer que esta colaboração não ocorre como fruto de uma ação articulada e planejada entre os INCTs, mas provém de afinidades entre os pesquisadores dos diferentes institutos atuando em temas complementares ou similares.

Uma análise realizada pelo seu comitê gestor revela que os pesquisadores do INCTAA despendem muito tempo na consolidação da sua própria proposta, restando muito pouco para ser dedicado às ações de integração com outros

institutos. A sobrecarga dos pesquisadores, todos eles professores e envolvidos em muitas atividades de ensino e pesquisa além do INCTAA, impedem a priorização de ações coordenadas de aproximação e integração com outros institutos. Foi diagnosticado que somente com o decorrer de um período maior de tempo e com a consolidação definitiva do INCTAA, as ações de integração poderiam ser mais bem conduzidas.

Além disso, os pesquisadores do INCTAA, devido ao seu caráter multidisciplinar, congregam uma série de especialidades que supre de forma satisfatória as necessidades de integração por meio de seus próprios membros, minimizando a necessidade de interação com outros INCTs.

Desta forma, no momento, a integração, quando ocorre, resulta de iniciativas individuais dos pesquisadores dos INCTs, decorrentes geralmente das afinidades históricas ou complementaridade em relação às suas áreas de pesquisa.

Em todo o caso, dentro dos limites mostrados acima, diversos trabalhos (abaixo listados), relacionados principalmente a resultados de pesquisa acadêmica, foram gerados no período que compreende este relatório, envolvendo pesquisadores do INCTAA e de outros INCTs.

1. Cooperação promovida pelos pesquisadores do INCTAA lotados no Instituto Nacional de Criminalística da Polícia Federal (Adriano Otávio Maldaner e Márcio Talhavini) e do INCT/INAM (Ingrid Weber e Marcella Auxiliadora de Melo Lucena) da Universidade de Brasília para o desenvolvimento de Marcadores Luminescentes para Identificação de Resíduos de Tiro. O projeto encontra-se em fase avançada e a atuação conjunta dos pesquisadores do INCTAA e INCT/INAMI permite antever a recomendação de marcadores luminescentes para uso forense. A cooperação estabelecida resultou na publicação do artigo:

Melo Lucena, M. A.; de Sa, G. F.; Rodrigues, M. O.; Alves, S., Jr.; Talhavini, M; Weber, I. T.; "$ZnAl_2O_4$-based luminescent marker for gunshot residue identification and ammunition traceability" *Analytical Meth.* **5** (2013), 705-709 DOI: 10.1039/c2ay25535a

b. Artigos publicados resultantes da colaboração de pesquisadores do INCTAA e outros INCTs:

2. Barin, J. S.; Pereira, J. S. F.; Mello, P. A.; Knorr, C. L.; Moraes, D. P.; Mesko, M. F.; Nóbrega, J. A.; Korn, M. G. A.; Flores, E. M. M. "Focused microwave-induced combustion for digestion of botanical samples and metals determination by ICP OES and ICP-MS". *Talanta*, 94 (2012) 308-314. DOI: 10.1016/j.talanta.2012.03.048. **Colaboração: INCTAA e INCT Energia e Ambiente.**

3. Borba, F. S. L.; Cortez, J.; Asfora, V. K.; Pasquini, C.; Pimentel, M. F.; Pessis, A.M.; Khoury, H. "Multivariate treatment of LIBS data of prehistoric paintings". *Journal of the Brazilian Chemical Society*", 23 (2012), 958 – 965. **Colaboração: INCTAA e Instituto Nacional de Arqueologia, Paleontologia e Ambiente do Semiárido – INAPAS.**

4. Ferreira, S. L. C.; Andrade, J. B.; Matos, G. D.; Lima, D. C.; Barbosa, J. T.; Korn, M.G.A.; Grassi, M.T. A separation system for lead fractionation in river water by electrothermal atomic absorption spectrometry. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 28 (2013) 156-160. DOI: 10.1039/C2JA30256J. **Colaboração: INCTAA e INCT Energia e Ambiente.**

5. Soares, V. R. B.; Rocha, F. R. P.; Teixeira, L. S. G. "Contributions of flow analysis for quality control of automotive fuels. A review". *Analytical Letters*, no prelo, 2013. DOI: 10.1080/00032719.2012.747095. **Colaboração: INCTAA e INCT Energia e Ambiente.**

6. Melo Lucena, M. A.; de Sa, G. F.; Rodrigues, M. O.; Alves, S., Jr.; Talhavini, M; Weber, I. T.; "ZnAl2O4-based luminescent marker for gunshot residue identification and ammunition traceability" *Analytical Meth.* **5** (2013), 705-709 DOI: 10.1039/c2ay25535a. **Colaboração: INCTAA e INAMI**

7. da Silva Junior, Ronaldo C.; Gomes, Cezar S.; Goulart Junior, Saulo S.; Almeida, Fernanda V.; Groberio, Tatiane S.; Braga, Jez W.; Zacca, Jorge J.; Vieira, Mauricio L.; Botelho, Elvio D.; Maldaner, Adriano O.. "Demystifying "oxi" cocaine: Chemical profiling analysis of a "new Brazilian drug" from Acre State" *Forensic Sci. Int.*, **221** (2012), 113-119 DOI: 10.1016/j.forsciint.2012.04.015. **Colaboração: INCTAA e INCTBio.**

8. Zacca, Jorge J.; Groberio, Tatiane S.; Maldaner, Adriano O.; Vieira, Mauricio L.; Braga, Jez W. "Correlation of Cocaine Hydrochloride Samples Seized in Brazil Based on Determination of Residual Solvents: An Innovative Chemometric Method for Determination of Linkage Thresholds". *Analytical Chemistry*, 85 (2013), 2457-2464. DOI: 10.1021/ac3034147. **Colaboração: INCTAA e INCTBio.**

CONSIDERAÇÕES FINAIS

COMENTAR OUTROS ASPECTOS RELEVANTES DO DESENVOLVIMENTO GERAL DO INCT:

Ao final do quarto ano de atividades pode-se dizer que o INCTAA está consolidado, podendo-se ter uma visão mais precisa do alcance das suas metas e objetivos.

O INCTAA foi construído sobre uma base acadêmica, mas que envolve a participação efetiva de vários setores da sociedade com abrangência nacional, agrupados para atuação em rede pela primeira vez, sem representar uma proposta de continuidade de ações de pesquisa anteriores. Este fato demandou cerca de dois anos de aprendizado para que as ações de rede se consolidassem e resultados significativos pudessem ser gerados. Atualmente, com o seu

mecanismo de operação mais bem conhecido e compreendido pelos participantes da rede, as ações fluem com maior agilidade, atingindo seus objetivos em tempo mais curto e com maior aproveitamento do parque instrumental instalado na instituição sede e nos laboratórios associados.

É possível detectar neste relatório o alto grau de integração entre os grupos de pesquisa participantes do INCTAA, a despeito das dificuldades de locomoção causadas pela distribuição geográfica abrangente das instituições participantes.

Talvez o exemplo mais marcante desta atuação integrada, que caracteriza de fato uma rede, venha do grupo de pesquisadores ligados às demandas da área da Química Ambiental, que produziu um diagnóstico inédito em nível nacional sobre o tema dos Contaminantes Emergentes. Os resultados obtidos serão brevemente compilados em um livro que será amplamente divulgado e colocado à disposição das autoridades competentes da área para auxiliá-las na elaboração de futuras normas e regulamentos que visem atestar a qualidade das águas servidas à população brasileira, considerando os aspectos relacionados a este tema.

Outras ações atestam o bom desempenho da rede. Por exemplo, grande parte dos trabalhos publicados pelos pesquisadores da rede, no período referente a este relatório, envolve a participação de mais de um grupo de pesquisa situados em diferentes laboratórios associados e na sede do INCTAA.

Devido à forma que o INCTAA está estruturado e seu *modus operandi*, os resultados de sua atuação refletem, como pode ser observado neste relatório parcial e nos anteriores, imediatamente em diversos setores da sociedade, pois ele age guiado por demandas reais identificadas junto desta própria sociedade. Assim, a transferência de conhecimento e tecnologia se dá de forma natural e rápida, como conseqüência do atendimento das demandas levantadas pelos próprios setores interessados, participantes diretos do instituto. No presente relatório podem-se observar resultados significativos no número de patentes solicitadas e no licenciamento de patentes. Consideramos que o licenciamento de uma patente, concebida e desenvolvida no âmbito do INCTAA, para o setor produtivo, constitui um resultado muito significativo atestando, ao se fechar o ciclo de inovação, que a proposta do INCTAA é correta.

As ações voltadas para a educação desenvolvidas pelo INCTAA, embora significativas, principalmente em nível de pós-graduação e graduação, poderiam ser mais intensas e abrangentes. Gostaríamos de ampliar estas ações e ainda envidaremos esforços no período que resta de vigência do projeto para que isso aconteça. Neste tema, gostaria de destacar as ações empreendidas em Serra Talhada, PE e em João Pessoa, PB, lideradas pelas Profas. Andréa Monteiro Santana da Silva e Tereza Cristina Bezerra Saldanha, que atingiram um número expressivo de alunos de graduação e do ensino médio, servindo para divulgar, ao mesmo tempo, o INCTAA, a Química e a Química Analítica. Diversas outras ações voltadas para educação e formação poderiam ser mencionadas aqui, porém, devido ao interesse atual pelo tema “Ética em Pesquisa”, gostaríamos de destacar a atuação da Profa. Solange Cadore, pesquisadora da instituição sede do INCTAA, que ministrou um número muito grande de palestras(13) durante o ano de 2012 e participou de diversos eventos divulgando em nome do INCTAA uma preocupação do instituto que é de interesse geral dos pesquisadores nacionais.

O presente projeto caminha para sua finalização no início do próximo ano. No entanto, a experiência tem sido tão motivadora para o grupo de pesquisadores participantes, que novas metas e objetivos continuam a ser implantados, como no caso das novas linhas em Espectroscopia Terahertz no Domínio do Tempo e Imagem Hiperespectral na região do Infravermelho Próximo, destacadas no presente relatório.

Os destaques associados à pesquisa, ensino e extensão do conhecimento, resultantes das atividades do INCTAA, demonstram que a sua meta principal de atender as demandas analíticas reais Brasileiras está sendo atingida com eficácia, criando um novo paradigma na relação dos setores da sociedade interessados nos resultados das Ciências Analíticas com a academia.

Diante deste cenário exitoso, espera-se que seja dada continuidade a iniciativa dos INCTs e que uma nova proposta possa ser encaminhada no futuro para que os resultados dos esforços empreendidos durante o período de cinco anos não sejam perdidos e possam continuar a produzir resultados relevantes, no caso do INCTAA, para a área das Ciências Analíticas Brasileiras.

LOCAL E DATA: Campinas 15 de Maio de 2013.

ASSINATURA:

ANEXO I – INDICADORES DE PESQUISA

AI.1. REGISTROS DE SOFTWARE PROTOCOLADOS:

AI.1.1. Programa de computador desenvolvido para aquisição de dados e interface com o usuário referente ao fotômetro NIR dedicado à determinação do tempo de indução (TI) e estabilidade oxidativa de óleos e biodiesel.

Data de Protocolo: 12/03/2013
Número do Protocolo: 018130007881
Processo: BR 51 2013 000213 3
Título: TINIRES
Autores: Celio Pasquini e Francisco Senna Vieira

AI.1.2. Programa de computador desenvolvido para aquisição de dados e interface com o usuário referente ao espectrofotopolarímetro desenvolvido pelos pesquisadores do INCTAA.

Data de protocolo: 09.05.2013
Número do protocolo: 018130015409
Número do processo: BR 51 2013 00463 2
Título: SPECTROPOL
Autores: Celio Pasquini, Jarbas José Rodrigues Rohwedder e Livia Paulia Dias Ribeiro

AI.2. REGISTROS DE SOFTWAE CONCEDIDOS:

AI.2.1. Programa de computador desenvolvido para aquisição de dados e interface com o usuário referente ao instrumento polarimétrico desenvolvido e patenteado pelos pesquisadores do INCTAA.

Publicado na Revista da Propriedade Industrial nº 2198, de 19.02.13.

Título do Programa: POL_SAC
Instituição: Universidade Estadualdd e Campinas – UNICAMP
Autores: Celio Pasquini, Jarbas José Rodrigues Rohwedder, Lívia Paulia Dias Ribeiro
Data da concessão do registro: 16/03/2012

AI.3. PATENTES SOLICITADAS:

AI.3.1.

Título: PROCESSO DE EXTRAÇÃO SELETIVA DE OURO POR MEIO DE SISTEMA AQUOSO BIFÁSICO - SAB E USO DO SAB NA EXTRAÇÃO SELETIVA DE OURO.
Data de Protocolo: 14/09/2012
Número do Processo: PI014120002203
Autores: da Silva, M.C.H.; da Silva, L. H. M. ; Rodrigues, G. D. ; de Lemos, L. R.
Instituição: Universidade Federal de Viçosa – Viçosa - MG

AI.3.2.

Título: DISPOSITIVO E MÉTODO DE DETERMINAÇÃO DE ROTAÇÕES ÓPTICAS E USO.
Data de Protocolo: 07/05/2012
Número do Protocolo: 018120015846
Número do Processo: BR 10 2012 010741 4
Autores: Célio Pasquini, Lívia Paulia Dias Ribeiro, Jarbas José Rodrigues Rohwedder e Matheus Angeluzzi Jardim

Instituição: Instituto de Química - UNICAMP

AI.3.2.
Título: FOTÔMETRO DE EMISSÃO NA REGIÃO DO INFRAVERMELHO PRÓXIMO
Data de Protocolo: 30/10/2012
Número da Protocolo: 018120040393
Número do processo: BR 10 2012 027831 6
Autores: Celio Pasquini e Francisco Senna Vieira
Instituição: Instituto de Química – UNICAMP

AI.3.3.
Título: SISTEMA AUTOMATIZADO PARA EXTRAÇÃO EM FASE SÓLIDA
Data do protocolo: 23/07/2012
Número de protocolo: 018130009751.
Autores: Orlando, R. M.; Rohwedder, J. J. R.; Rath, S.
Instituição: Instituto de Química - UNICAMP

AI.3.4.
Título: KIT E TAMPA PARA COLETA DE ELUATO EM PROCEDIMENTOS DE EXTRAÇÃO EM FASE SÓLIDA.
Data do Protocolo: 23/07/2012
Número do Protocolo: 0181210026683 - PCT; PCT/BR/PI1105218-0. Pedido de patente nos Estados Unidos
Autores: Orlando, R. M.; Rath, S.; Rohwedder, J. J. R.
Instituição: Instituto de Química - UNICAMP

AI.4. ARTIGOS PUBLICADOS (referentes ao período deste relatório anual e considerando somente a produção resultante de atuação dos pesquisadores em ações apoiadas pelo INCTAA):

1. Amaral, C. D.; Nobrega, J. A.; Nogueira, A. R. A., "Sample preparation for arsenic speciation in terrestrial plant - A Review". *Talanta*, aceito para publicação em 19/04/2013 (Manuscript Number: TAL-D-13-00900).

2. Batista, A. D.; Rocha, F. R. P. "A green flow-injection procedure for fluorimetric determination of bisphenol A in tap waters based on the inclusion complex with β-cyclodextrin". *International Journal of Environmental Analytical Chemistry*, no prelo, 2013.

3. Borges, G.B.C; Rohwedder, J.J.R.; Bortoni, E.C. Evaluation of the use of Near Infrared Spectroscopy (NIR) for on-line Monitoring of Power Transformer Insulation Oil. AASRI Procedia, v. 2, p. 56-61, 2012.

4. Cortez J.; Pasquini, C. Ring-Oven Based Preconcentration Technique for Microanalysis: Simultaneous Determination of Na, Fe, and Cu in Fuel Ethanol by Laser Induced Breakdown Spectroscopy. *Analytical Chemistry (Washington)*, v. 85, p. 1548-1554, 2013. DOI: 10.1021/ac302755h

5. Crispino, C. C.; Reis, B. F. "Development of a multicommuted flow analysis procedure for photometric determination of total n-ureide in soybean tissues". *Journal of the Brazilian Chemical Society*. Published online: March 19, 2013. DOI 10.5935/0103-5053.20130065.

6. da Silva Junior, Ronaldo C.; Gomes, Cezar S.; Goulart Junior, Saulo S.; Almeida, Fernanda V.; Groberio, Tatiane S.; Braga, Jez W.; Zacca, Jorge J.; Vieira, Mauricio L.; Botelho, Elvio D.;

Maldaner, Adriano O.. “Demystifying "oxi" cocaine: Chemical profiling analysis of a "new Brazilian drug" from Acre State”. *Forensic Science International*, 221 (2012), 113-119. DOI: 10.1016/j.forsciint.2012.04.015.

7. de Lemos, L. R.; da Silva, L. H. M.; da Silva, M.C.H. “Monosegmented Flow Analysis Exploiting Aqueous Two-phase Systems for the Determination of Cobalt”. *Analytical Sciences*, 28 (2012) 1213-1218. DOI:10.2116/analsci.28.1213.

8. de Lemos, L. R.; Santos, I. J. B.; Rodrigues, G. D.; da Silva, L. H. M.; da Silva, M.C.H. “Copper recovery from ore by liquid liquid extraction using aqueous two-phase system”. *Journal of Hazardous Materials (Print)*, 237-238 (2012) 209-214. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2012.08.028.

9. Dias, T. R.; Reis, B. F. “A LED Based Photometer for Solid Phase Photometry: Zinc Determination in Pharmaceutical Preparation Employing a Multicommuted Flow Analysis Approach”. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 23 (2012) 1515-1522.

10. Donati, G. L.; Amais, R. S.; Nóbrega, J. A. “Improving accuracy in inductively coupled plasma-quadrupole mass spectrometry: The interference standard method”. *Spectroscopy*, 27 (2012) 44-49.

11. Donati, G. L.; Amais, R. S.; Nóbrega, J. A. “Interference standard and oxide ion detection as strategies to determine phosphorus and sulfur in fuel samples by inductively coupled plasma quadrupole mass spectrometry”. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 27 (2012) 1274-1279. DOI: 10.1039/c2ja30038a.

12. Donati, G. L.; Amais, R. S.; Nóbrega, J. A. “Strategies to improve accuracy and sensitivity in phosphorus determinations by inductively coupled plasma quadrupole mass spectrometry”. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 23 (2012) 786-791. DOI: 10.1590/S0103-50532012000400026.

13. Frizzarin, R. M.; Rocha, F. R. P. “A multi-pumping flow-based procedure with improved sensitivity for the spectrophotometric determination of acid-dissociable cyanide in natural waters”. *Analytica Chimica Acta*, 758 (2013) 108-113. DOI: 10.1016/j.aca.2012.10.059.

14. Fróis, S. R.; Grassi, M.T.; Campos, M. S.; Abate, G. “Determination of Cr(VI) in water samples by ICP OES after separation of Cr(III) by Montmorillonite”. *Analytical Methods*, 4 (2012) 4389-4394. DOI: 10.1039/C2AY26125A.

15. Gonzaga, F. B.; Pasquini, C. “A compact and low cost laser induced breakdown spectroscopic system: Application for simultaneous determination of chromium and nickel in steel using multivariate calibration”. *Spectrochimica Acta Part B*, 69 (2012) 20-24. DOI: 10.1016/j.sab.2012.02.007.

16. Gonzaga, F. B.; Sobral, S. P. “A new method for determining the acid number of biodiesel based on coulometric titration”. *Talanta*, 97 (2012) 199-203. DOI: 10.1016/j.talanta.2012.04.017.

17. Maldaner, A. O.; Schmidt, L. L.; Locatelli, Marco A. F.; Jardim, W. F.; Sodre, F. F.; Almeida, F. V.; Pereira, C. E. B.; Silva, C. M. “Estimating Cocaine Consumption in the Brazilian Federal District (FD) by Sewage Analysis”. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 23 (2012), 861-867.

18. Melchert, W. R.; Batista, A. D.; Pereira, A. C.; Rocha, D. L.; Rocha, F. R. P. “A multi-pumping flow system for fast spectrophotometric determination of simvastatin”. *Current Pharmaceutical Analysis*, 9 (2013) 114-120. DOI: 10.2174/157341213804806151.

19. Melchert, W. R.; Reis, B. F.; Rocha, F. R. P. “Green chemistry and the evolution of flow analysis. A review”. *Analytica Chimica Acta*, 714 (2012) 8-19. DOI: 10.1016/j.aca.2011.11.044.

20. Melo Lucena, M. A.; de Sa, G. F.; Rodrigues, M. O.; ; Alves, S., Jr.; Talhavini, M; Weber, I. T.; "ZnAl2O4-based luminescent marker for gunshot residue identification and ammunition traceability". *Analytical Methods,* 5 (2013), 705-709. DOI: 10.1039/c2ay25535a.

21. Peixoto, R.R.A.; Oliveira, A.; Cadore, S.; "Multielemental determinations in chocolate drink powder using multivariate optimization and ICP OES". *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 60 (2012) 8117-8122. DOI dx.doi.org/10.1021/jf303022r.

22. Pereira, A. C.; Rocha, F. R. P. "A multicommuted flow system with liquid-liquid microextraction for determination of anionic surfactants in freshwaters". *Analytical Methods*, 5 (2013) 2104–2109. DOI: 10.1039/c3ay26335e.

23. Ribeiro, L.P.D.; Rohwedder, J.J.R.; Pasquini, C. A new approach to polarimetric mesurements based on birrefringente crystals and diodes lasers. Analytica Chimica Acta, 77,1, 1-6, 2013.

24. Ribeiro, M. S.; Rocha, F. R. P. "A single-phase spectrophotometric procedure for in situ analysis of free glycerol in biodiesel". *Microchemical Journal*, 106 (2013) 23-26. DOI: 10.1016/j.microc.2012.04.011.

25. Rocha, D. L.; Batista, A. D.; Donati, G. L.; Nóbrega, J. A.; Rocha, F. R. P. "Greening sample preparation in inorganic analysis". *Trends in Analytical Chemistry*, 45 (2013) 79-92. DOI: 10.1016/j.trac.2012.12.015.

26. Rocha, D. L.; Rocha, F. R. P. "A multi-pumping flow system with on-line photochemical conversion and improved sensitivity for phosphorus fractionation in freshwaters". *International Journal of Environmental Analytical Chemistry*, no prelo, 2013. DOI: 10.1080/ 03067319.2012.746324.

27. Rocha, D. L.; Rocha, F. R. P. "An environmentally friendly flow-based procedure with photo-induced oxidation for the spectrophotometric determination of chloride in urine and waters". *Microchemical Journal*, 108 (2013) 193-197. DOI: 10.1016/j.microc.2012.10.020.

28. Rodrigues, G. D.; de Lemos, L. R.; da Silva, L. H. M.; da Silva, M. C. H. "Application of hydrophobic extractant in aqueous two-phase systems for selective extraction of cobalt, nickel and cadmium". *Journal of Chromatography* (Print), 1279 (2013) 13-19. DOI: 10.1016/j.chroma.2013.01.003.

29. Santos, I. J. B.; de Carvalho, R. M. M.; da Silva, M. C. H.; da Silva, L. H. M. "Phase Diagram, Densities, and the Refractive Index of New Aqueous Two-Phase System Formed by PEO1500 + Thiosulfate + H2O". *Journal of Chemical and Engineering Data*, 57 (2012) 274-279. DOI: 10.1021/je200744s.

30. Santos, V. C. G.; Campos, M.S.; Grassi, M.T.; Zamora, P. G. P.; Abate, G. "Multivariate optimization of mercury determination by flow injection-cold vapor generation-inductively coupled plasma optical emission spectrometry". *Analyst*, 137 (2012) 4458-4463. DOI:10.1039/C2AN35627A.

31. Senra, T. D. A.; da Silva, M. C. H.; Bonomo, R. C. F.; da Silva, L. H. M. "Thermodynamics and optimization of norbixin transfer processes in aqueous biphasic systems formed by polymers and organic salts". *Separation and Purification Technology (Print)*, 98 (2012) 69-77. DOI: 10.1016/j.seppur.2012.06.012.

32. Silva, C. S.; Borba, F. S. L.; Pimentel, M. F.; Pontes, M.J.C.; Honorato, R. S.; Pasquini, C. "Classification of blue pen ink using infrared spectroscopy and linear discriminant analysis". *Microchemical Journal,* 109 (2013) 122–127. DOI: 10.1016/j.microc.2012.03.025

33. Silva, C.G. A. da, Collins, C.H., “Stationary phases based on poly(methyloctadeclsiloxane) thermally immobilized onto titanized silica for high performance liquid chromatography”. *Microchemical Journal*, 109 (2013) 150-157. DOI: 10.1016/j.microc.2012.03.009.

34. Silva, C.G., Collins, C.H., “Improved chemical stabilities for end-capped high performance liquid chromatography stationary phases based on poly(methyloctadecylsiloxane) thermally immobilized onto metalized silicas”. *Journal of Chromatography A*, 1260 (2012) 81-87. DOI: 10.1016/j.chroma.2012.08.048.

35. Silva, R.G.C., Collins, C.H., Bottoli, C.B.G., “New silica-based monolithic columns for nano-liquid chromatography, used in the HILIC mode”. *Journal of Chromatographic Science*, 50 (2012) 649-657. DOI: 10.1093/chromsci/bms081.

36. Sousa, A.C.; Soares, A.S.; Coelho, C.J.; Gaião,E.N.; Pereira, A.F.C.; Galvão, R.K.H.; Araújo, M.C.U. “Screening analysis of seston from a domestic wastewater treatment plant using digital images”. *Analytical Methods*, 4,(2012), 2375-2380. DOI: 10.1039/c2ay05537f.

37. Sousa, R.A.; Sabarense, C.M.; Prado, G.L.P.; Metze, K.; Cadore, S.; “Lead biomonitoring in different organs of lead intoxicated rats employing GF AAS and different sample preparations”. *Talanta*, 104 (2012) 90-96. DOI: 10.1016/j.talanta.2012.11.043.

38. Souza, J. A. L.; Albuquerque, M. M.;Grangeiro Jr, S.; Pimentel, M.F.; Santana, D. P.; Simões, S. S. “Quantification of captopril disulphide as a degradation product in captopril tablets using near infrared spectroscopy and chemometrics”. *Vibrational Spectroscopy*, 62 (2012), 35 - 41. DOI: 10.1016/j.vibspec.2012.04.011

39. Souza, J. A. L.; Albuquerque, M. M.;Grangeiro Jr, S.; Pimentel, M.F.; Santana, D. P.; Simões, S. S. “Quantification of captopril disulphide as a degradation product in captopril tablets using near infrared spectroscopy and chemometrics”. *Vibrational Spectroscopy*, 62 (2012), 35 - 41. DOI: 10.1016/j.vibspec.2012.04.011.

40. Vieira, G. P.; Crispino, C. C.; Perdigão, S. R. W.; Reis, B. F. “An environmentally friendly photometric procedure for ammonium determination in rainwater employing a multicommutation approach”. *Analytical Methods*, 5 (2013) 489-495. DOI: 10.1039/c2ay26011e.

41. Vieira, G. P.; Perdigão, S. R. W.; Fiore, M. F.; Reis, B. F. “Development of a high sensitive automatic setup for screening of microcystins in surface waters by employing a LED-based photometric detector”. *Sensors And Actuators B-Chemical*, 161 (2012) 422-428. DOI: 10.1016/j.snb.2011.10.054.

42. Zacca, Jorge J.; Groberio, Tatiane S.; Maldaner, Adriano O.; Vieira, Mauricio L.; Braga, Jez W. “Correlation of Cocaine Hydrochloride Samples Seized in Brazil Based on Determination of Residual Solvents: An Innovative Chemometric Method for Determination of Linkage Thresholds”. *Analytical Chemistry*, 85 (2013), 2457-2464. DOI: 10.1021/ac3034147.

ANEXO II – INDICADORES DE TRANSFERÊNCIA DE CONHECIMENTO E TECNOLOGIA

A.II.1. Parceria com a Rede Nacional de Espectroscopia NIR:

O coordenador do INCTAA, Prof. Celio Pasquini participou em 2010, em Brasília, de reunião com a EMBRAPA para elaborar um projeto que visa o estabelecimento de uma Rede de Espectroscopia no Infravermelho Próximo (NIR) a qual conta atualmente com a participação de 25 unidades da EMBRAPA distribuídas por todo o país. A rede NIR da EMBRAPA é a primeira rede nacional nesta tecnologia.

A importância da tecnologia NIR para a área agrícola é reconhecida mundialmente e o Brasil encontra-se atrasado em relação a países como os Estados Unidos, Canadá, França, Bélgica e Austrália, para citar somente alguns, em relação a ações em rede que permitem a plena utilização dos benefícios da tecnologia. A constituição da rede EMBRAPA significa, portanto, um avanço de alta relevância para o país e para seu setor agrícola que passará a contar com uma ferramenta poderosa de controle de qualidade de produtos agro-pecuários, de auxílio à seleção de espécies de plantas mais adequadas ao clima e solo de plantio e de aumento de produtividade. Antecipa-se um impacto muito grande no uso da tecnologia NIR em diversas áreas estratégicas para a economia do país.

O projeto foi aprovado pela EMBRAPA em Março de 2011 (Projeto no. 05.10.08.002.00.00), com cronograma de execução de 3 anos e com um orçamento de R$ 650.000,00.

O **INCTAA é parceiro da EMBRAPA** neste projeto e está transferindo o conhecimento detido pelos seus pesquisadores nas áreas de Espectroscopia NIR, Quimiometria e Instrumentação Analítica para treinar e compor a Rede em Espectroscopia NIR.

No período deste relatório ocorreu o II Workshop da Rede NIR da EMBRAPA em João Pessoa – PB, com a participação de pesquisadores do INCTAA que ministraram treinamento em Calibração Multivariada para os cerca de 40 participantes do evento.

Como resultado desta parceria, os pesquisadores do INCTAA da unidade da EMBRAPA Gado de Corte situada em São Carlos lideraram o desenvolvimento de Modelos de Calibração Multivariada em Espectroscopia de Infravermelho Próximo para Amostras de Forrageiras. Este resultado é o mais expressivo do período – apesar de ainda estar em desenvolvimento. Trata-se ao mesmo tempo de formação de recurso humano e a obtenção de resultados altamente promissores, com propostas de criação de modelos de regressão para plantas forrageiras tropicais (foi obtido o modelo para Brachiaria brizantha), com aplicação imediata pelos laboratórios que participam da rede NIRS-Embrapa; propostas inovadoras quanto ao auxílio a outras linhas de pesquisa no INCTAA, como na produção de materiais de referência (avaliação das propriedades e estudos de estabilidade de amostras utilizadas em ensaio de proficiência) e avaliações qualitativas (nutricionais) de plantas forrageiras, proposição que demonstrou ser tão eficiente quanto determinações quantitativas na avaliação da homogeneidade de material a ser preparado para distribuição em ensaio de proficiência. Além disso o fortalecimento de rede de colaboradores que se dedicam ao desenvolvimento de trabalhos em uma mesma linha de pesquisa certamente aumentará o impacto dos resultados obtidos.

A.II.2. Licenciamento de Patente

As medidas polarimétricas são utilizadas intensivamente na indústria farmacêutica e nas usinas de **produção de bio-etanol e de açúcar**. No caso das usinas, as medidas polarimétricas (rotação óptica) são responsáveis diretamente pelo controle de qualidade da matéria prima da usina, monitorando o teor de sacarose no caldo de cana-de-açúcar.

Um novo princípio de obtenção de medidas de rotação óptica de substâncias opticamente ativas foi desenvolvido no Instituto de Química da UNICAMP, resultante das atividades do INCTAA.

Este novo princípio gerou um instrumento construído e avaliado como parte da tese de doutorado da aluna Lívia Paulia Dias orientada pelo Prof. Celio Pasquini, dentro da linha de Instrumentação Analítica do INCTAA. A patente de invenção foi solicitada junto ao INPI tendo o protocolo o número: BR10 2012 010741 4.

Esta tecnologia foi licenciada para a empresa ENCIBARELA por meio de contrato promovido pela agência de inovação da UNICAMP (INOVA), com a interveniência da FUNCAMP em 02 de Dezembro de 2012. A ECIMBARELA pretende iniciar a comercialização do instrumento no final de 2013.

A.II.3. Transferência direta de resultados de pesquisa para a Polícia Federal.

No período referente a este relatório, foi desenvolvido o projeto demandado pela Polícia Federal cujo objetivo era o de prover a PF de um método rápido e que pudesse ser aplicado em campo para determinar a origem de gasolinas.

A entrada ilegal de gasolina automotiva de origem estrangeira em território brasileiro é um problema que causa preocupação às autoridades brasileiras responsáveis por esse tipo de fiscalização. Acontece com maior frequência nas fronteiras com alguns países como Peru, Paraguai, Bolívia e, principalmente, Venezuela. A principal causa desse problema é devido à diferença de preços da gasolina praticado no Brasil comparado a estes países.

Por conter etanol, a gasolina brasileira pode ser facilmente distinguida das outras a partir do método de referência para determinação de teor de álcool etílico anidro combustível (AEAC), estabelecido pela norma ABNT NBR 13992. No entanto, de acordo com a Polícia Federal, o etanol tem sido adicionado intencionalmente em gasolinas estrangeiras apreendidas. Logo, a identificação rápida dessas gasolinas se torna mais complexa. Desta forma, torna-se necessário desenvolver um método analítico simples, robusto, não destrutivo e rápido, utilizando a espectroscopia no infravermelho médio e técnicas quimiométricas para classificar gasolinas automotivas como pertencente ao Brasil e a Venezuela.

O método desenvolvido pelos pesquisadores do INCTAA, Maria Fernanda Pimentel, Fernanda Honorato e Ricardo Honorato, utilizando a técnica multivariada de classificação PLS-DA juntamente com a espectroscopia na região do infravermelho médio conseguiu classificar, de maneira eficiente, as gasolinas analisadas, atingindo 100% de classificação correta.

ANEXO III – INDICADORES DE EDUCAÇÃO E DIVULGAÇÃO DA CIÊNCIA

A.III.1. Cursos, Disciplinas e Treinamentos

AIII.1.1. Ana Rita de Araújo Nogueira e Gilberto Batista de Souza (EMBRAPA). Minicurso: espectroscopia de infravermelho próximo (NIRS). IV Workshop do EPLNA. 2013.

AIII.1.2. Ana Rita de Araújo Nogueira Gilberto Batista de Souza (EMBRAPA). Minicurso: preparo de amostra e espectrometria de emissão óptica com plasma acoplado indutivamente (ICP OES). IV Workshop do EPLNA. 2013.

AIII.1.3. Maria Fernanda Pimentel Avelar e Celio PAsquini. Treinamento sobre Calibração Multivariada e Transferência de Modelos – Ministrado durante o II Workshop da Rede NIR da EMBRAPA, João Pessoa/PB, 2012.

AIII.1.4. Maria Fernanda Pimentel Avelar. Ministrada a disciplina “Tópicos especiais em Química - Tratamento de dados de Imagem”, no programa de pós-graduação em Química da UFPE, 60h, em 2012. Essa disciplina foi consequência do curso Tratamento Multivariado de Imagens, oferecido em janeiro de 2012 (com apoio do INCTAA), pelos professores Alberto Ferrer (UPV-Espanha), José Manuel Pratts (UPV-Espanha) e Anna de Juan (Universidade de Barcelona, Espanha).

AIII.1.5. Fabiano Barbieri Gonzaga. Treinamento: Provimento de Rastreabilidade Metrológica às Medições de pH e Condutividade Eletrolítica na América do Sul . 24/09/2012 a 04/10/2012. Local: Inmetro, Duque de Caxias (Xerém). Carga horária: 42 horas

AIII.1.6. Edvaldo da Nòbrega Gaião. Minicurso: "Eletrônica Básica para Cientistas”, ministrado durante a IV Semana de Química da UAST/UFRPE, em novembro de 2012 (6h).

A.III.2. Eventos Realizados

AIII.2.1. Ana Rita de Araújo Nogueira e Gilberto Batista de Souza (EMBRAPA). IV Workshop do EPLNA – Ensaio de Proficiência dos Laboratórios de Nutrição Animal – participação de 100 laboratórios do Brasil, 1 da Colômbia e 1 do Chile, realizado em 4 e 5 de abril de 2013.

AIII.2.2. Ana Rita de Araújo Nogueira e Gilberto Batista de Souza (EMBRAPA) (EMBRAPA). Participação e organização do “17º MET – Encontro Nacional de Metodologias e Gestão de Laboratórios de Embrapa”, realizado em outubro/2012. Os membros do INCTAA participaram da organização do evento da apresentação de palestras (3), coordenação de grupos de discussão e apresentação de resumos.

AIII.2.3. Cadore, Solange. 12th Rio Symposium on Atomic Spectrometry. Foz do Iguaçu – PR. 2012.

AIII.2.4. Andréa Monteiro Santana Silva Brito e Edvaldo da Nóbrega Gaião. IV Semana de Química: Compondo e Recompondo a Química. Período: 05 a 09 de Novembro de 2012. Local: Serra Talhada

AIII.3. Teses de Doutorado Defendidas no Período

AIII.3.1. Carla Maíra Bossu. “Produção e caracterização de material de referência de forrageira para nutrientes e contaminantes inorgânicos”. 2012. Universidade Federal de São Carlos. Orientador: Ana Rita A. Nogueira.

AIII.3.2. Guilherme Dias Rodrigues. “Desenvolvimento e aplicação de novos sistemas aquosos bifásicos para determinação e separação de metais”. 2012. Universidade Federal de Viçosa. Orientador: Maria do Carmo Hespanhol da Silva.

AIII.3.3. Leandro Rodrigues de Lemos. “Recuperação de metais com alto valor agregado utilizando sistemas aquosos bifásicos”. 2012. Universidade Federal de Viçosa. Orientador: Maria do Carmo Hespanhol da Silva.

AIII.3.4. Daiane Placido Torres. “Mercúrio: Validação de Método para Determinação em Peixe e Camarão e Avaliação da sua Distribuição em Tecidos de Caranguejos e Efeito da Presença de Selênio”. 2013. Universidade Estadual de Campinas. Orientador: Solange Cadore.

AIII.3.5. Mário Henrique M. Killner, Emprego da espectroscopia NIR e RMN ^{1}H de baixo campo no monitoramento da reação de transesterificação para a produção de biodiesel. Determinação de parâmetros de qualidade de diesel por ^{1}H de baixo campo, UNICAMP, Campinas-SP 19/04/2013, orientador Jarbas J. R. Rohwedder.

AIII.3.6. Gilze Belém Chaves Borges, Avaliação do emprego da espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) na determinação de gases gerados pela decomposição de óleos minerais em equipamento elétricos, UNIFEI, Itajubá-MG, 03/04/2013, coorientador Jarbas J. R. Rohwedder.

AIII.3.7.Lívia Paulia Dias Ribeiro, Espectropolarimetria e Polarimetria Baseadas em Cristais Birrefringentes para as Regiões Espectrais do Visível e Infravermelho Próximo. 2012. Universidade Estadual de Campinas. Orientador: Celio Pasquini.

AIII.3.8. Juliana Cortez, Pré-Concentralção Baseada na Técnica de Ring Oven para Microanálise: Determinação Simultânea de Sódio, Ferro e Cobre em Etanol Hidratado Combustível por Espectroscopia de Emissão Óptica em Plasma Induzido por Laser (LIBS). 2012. Universidade Estadual de Campinas. Orientador: Celio Pasquini.

AIII.3.9. Flávia de Souza Lins Borba. Desenvolvimento de métodos espectroanalíticos aplicados à documentoscopia, bens culturais e alimentos. 2012. Universidade Federal de Pernambuco. Orientador: Maria Fernanda Pimentel Avelar. Co-orientador: Ricardo Honorato

AIII.4. Dissertações de Mestrado Defendidas no Período

AIII.4.1. Pamela da Rocha Patrício. “Extração e purificação de antocianinas utilizando sistemas aquosos bifásicos”. 2012. Universidade Federal de Viçosa. Orientador: Maria do Carmo Hespanhol da Silva.

AIII.4.2. Gabriel Max Dias Ferreira. “Comportamento de partição de cocaína e de seus adulterantes em sabs: proposta de um novo método para a identificação da droga”. 2012. Universidade Federal de Viçosa. Co-Orientador: Maria do Carmo Hespanhol da Silva.

AIII.4.3. Felisberto Gonçalves dos Santos Juniot. “Desenvolvimento de uma nova versão do injetor comutador automático: Determinação fotométrica de etanol em bebidas destiladas”. Universidade de São Paulo. Orientador: Boaventura Freire dos Reis.

AIII.4.4. Francisco Senna Vieira. Desenvolvimento e Avaliação de um Instrumento para Determinação de Estabilidade Oxidativa Baseado em Espectroscopia de Emissão no Infravermelho Próximo. 2012. Universidade Estadual de Campinas. Orientador: Celio Pasquini.

A.III.5. Palestras e Seminários Proferidos pelos Pesquisadores do INCTAA

AIII.5.1. Grassi, M.T. “Contaminantes emergentes em ambientes aquáticos”. Programa de Seminários, Instituto de Química, UNESP, Araraquara. 2013.

AIII.5.2. Grassi, M.T. “Coleta, transporte e armazenamento de amostras de água”. I Seminário de Controle de Qualidade da Água; CISMAE, Maringá. Instituição promotora / financiadora: Fundação Nacional de Saúde – FUNASA. 2012.

AIII.5.3. Grassi, M.T. “Contaminantes Emergentes en Ambientes Acuáticos”. Universidad de Caldas, Manizales. Instituição promotora: Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. 2012.

AIII.5.4. Grassi, M.T. “Contaminantes químicos emergentes”. V Simpósio Científico dos Pós-Graduandos do CENA/USP. Instituição promotora / financiadora: Centro de Energia Nuclear na Agricultura – USP. 2012.

AIII.5.5. Grassi, M.T. “Contaminantes químicos emergentes: novas perspectivas”. VI Encontro Nacional de Química Ambiental; UEL, Londrina. Instituição promotora / financiadora: Universidade Estadual de Londrina. 2012.

AIII.5.6. Grassi, M.T. “Especiação, comportamento e destino do cobre em ambientes aquáticos sob influência de atividades antrópicas: o exemplo do Rio Iguaçu na Região Metropolitana de

Curitiba". 3º Encontro Brasileiro sobre Especiação Química; Bento Gonçalves. Instituição promotora / financiadora: Universidade Federal de Santa Maria. 2012.

AIII.5.7. Collins, C.H. "Histórico do desenvolvimento das técnicas de separação: Minha visão", III Escolha de Inverno de Separação, IQ-Unicamp, Campinas, 2012.

AIII.5.8. Collins, C. H. "Avanços recentes em fases estacionárias para CL", Simpósio Satélite do XIV Congresso Latino-Americano de Cromatografia e Técnicas Relacionadas, Florianópolis/SC, 2012.

AIII.5.9. C.H. Collins, "Fases Estacionárias Modernas para CLAE", Departamento de Química, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Riberão Preto, Universidade de São Paulo. 2013.

AIII.5.10. Simões, S. S. "Química Analítica de Processos." Ciclo de palestras da Universidade Estadual da Paraíba-UEPB. 2012.

AIII.5.11. Silva, M. C. H. "Sistemas aquosos bifásicos: uma alternativa ambientalmente segura para especiação, pré-concentração e separação de analitos estratégicos". Programa de pós-graduação de química da UFPR. 2012.

AIII.5.12. Silva, M. C. H. "Uso de sistemas aquosos bifásicos como técnica verde de extração". Palestra no XXVI Encontro Regional da Sociedade Brasileira de Química. Minas Gerais. 2012.

AIII.5.13. Pontes, M. J. C. "Uso de Técnicas de Reconhecimento de Padrões em Química Analítica". EMBRAPA ALGODÃO - Campina Grande - PB. Agosto de 2012.

AIII.5.14. Rocha, F.R.P. "Estratégias para aumento de sensibilidade em espectrofotometria UV-Vis". Programa de Pós-Graduação em Agroquímica, Departamento de Química, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa-MG. 2012.

AIII.5.15. Honorato, R. "Química Analítica Forense". Universidade Federal do Pernambuco. Recife-PE. 2012.

AIII.5.16. Honorato, R. "A Química e a Polícia Federal", Escola de Química Professor Ricardo Ferreira, Recife-PE. 2012.

AIII.5.17. Honorato, F. A. "Uma abordagem analítica no controle de qualidade de combustíveis e biocombustíveis". 3º Encontro Nacional de Química Forense. Ribeirão Preto/SP. 2012.

AIII.5.18. Pimentel Avelar, M. F. "Transferência de Calibração". III Workshop de Quimiometria. 2012.

AIII.5.19. Cadore, Solange. "É Possível Fazer Pesquisa com Qualidade e Ética?". UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 2012.

AIII.5.20. Cadore, Solange. "Pesquisa, Qualidade e Ética: Por Que Falar Sobre Isso?" UFPel, Pelotas, RS, 2012.

AIII.5.21. Cadore, Solange. "Comportamento Ético em Pesquisa Científica". UFJF, Juiz de Fora, MG, 2012.

AIII.5.22. Cadore, Solange. "Pesquisa com Ética e Qualidade – É possível" UNIFAL, Alfenas, MG, 2012.

AIII.5.23. Cadore, Solange. "Ética na Pesquisa". UFGD, Dourados, MT, 2012.

AIII.5.24. Cadore, Solange. "Ética na Pesquisa". UFPA, Belém, PA, 2013.

AIII.5.25. Cadore, Solange. "Pesquisa com Ética", USP-SP, São Paulo, SP, 2013.

AIII.5.26. Cadore, Solange. "O Desafio de Fazer Pesquisa com Ética". PUC-RIO, Rio de Janeiro, RJ, 2013.

AIII.5.27. Cadore, Solange. “O Desafio de Fazer Pesquisa com Ética”. IV Bionatural e III Workshop de Químicade Microorganismos , Belém, PA, 2013.

AIII.5.28. Cadore, Solange. “Comportamento Ético na Pesquisa”, Semana de Química, UNEB, Salvador, BA, 2012.

AIII.5.29. Cadore, Solange. “Ética na Pesquisa”. Mesa Redonda. Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 2012.

AIII.5.30. Cadore, Solange. “Ética”. Mesa Redonda. IQ/Unesp – Araraquara, 2012.

AIII.5.31. Cadore, Solange. “Ética na Pesquisa”. Mesa Redonda. UFABC, 2012.

AIII.5.32 Cadore, Solange. “O Químico que o Brasil Precisa”. Mesa Redonda. XXXIII Escola de Verão em Química, UFSCar, 2013.

A.III.6. Capítulos de Livros Publicados

AIII.6.32. Pasquini, C. Laser Induced Breakdown Spectroscopy. In: B. Denker; E. Shklovsky. (Org.). Handbook of solid-State Lasers. 1ed.Oxford: Woodhead Publishing, 2013, v. 1, p. 551-568.

AIII.6.32. Alcalá, M. ; Blanco, M. ; Menezes, J. C. ; Felizardo, P. M. ; Garrido, A. ; Perez, D. ; Zamora, E. ; Pasquini, C. ; Romanach, R. J. Encyclopedia of Analytical Chemistry. Online. 1st ed. London: Wiley, 2012. v. 1. 46p .

ANEXO IV – INDICADORES DE EDUCAÇÃO E DIVULGAÇÃO DA CIÊNCIA
Exemplos de reportagens envolvendo o tema "Contaminantes Emergentes" abordado pelo INCTAA

Ano 05 - nº 252 - 08 de Julho de 2012 - Campos - RJ
3,00

Somos ASSIM

Pesquisa nacional comprova o que a Somos vem alertando:

Tratamento atual da água não retira hormônios e químicos

Águas do Paraíba utiliza sistema ineficiente para compostos suspeitos de aumentar a incidência de câncer

Entrevista exclusiva com Marco Tadeu Grassi, doutor em Química da UFP

Aberta a temporada de oficial de propaganda eleitoral. Conheça as regras

Apesar da torcida contra, TRE mantém Frederico B. Lemos na prefeitura de SFI

Coral Popular de São João da Barra oferece novos caminhos através da música

Empresa americana lança antipum

Servatis terá que pagar 38 milhões por poluir o Paraíba com veneno em 2008

Somos notícia

Pesquisa confirma o que a Somos vem alertando:

Tratamento atual da água é insuficiente para hormônios e contaminantes químicos

Águas do Paraíba utiliza sistema antiquado e ineficiente para compostos emergentes suspeitos de aumentar a incidência de alguns tipos de câncer

Há vários anos a Somos vem alertando sobre o grave problema da qualidade da água tratada consumida pela população de Campos. Uma das primeiras denúncias da revista mostrava que o atual processo de tratamento não é suficiente para detectar algumas substâncias e que existem várias substâncias que não são tratáveis pelos métodos atualmente utilizados.

A concessionária Águas do Paraíba continua utilizando um sistema antigo e pouco eficiente, que não elimina componentes como os hormônios, a cafeína (marcador) e defensivos agrícolas, detectados por pesquisadores da Uenf na água servida à maioria da população.

Além desses compostos químicos, a Somos publicou, em março deste ano, uma reportagem mostrando que outro grave problema chegava pelos canos da concessionária às casas dos campistas que consumiam a água vendida pela Águas do Paraíba. Pesquisadores da Uenf identificaram a presença de Cianobactérias, algas que são potencialmente tóxicas e que podem causar câncer.

Após reportagens com várias famílias que apontavam ter ficado doentes depois de consumir a água da concessionária, a Águas do Paraíba interrompeu o abastecimento da cidade afirmando ser um "procedimento de rotina". O fato é que, após esse procedimento, sintomaticamente, não foram relatados mais casos de cianobactérias.

Mas o problema não acaba por aí, na última edição da Somos, uma matéria mostrou que bebemos a água poluída por 182 municípios, os dados foram mostrados em uma série de matérias publicadas pelo jornal O Globo, que apontou que apenas 21% do esgoto das cidades ao longo da Bacia do Paraíba do Sul são tratados.

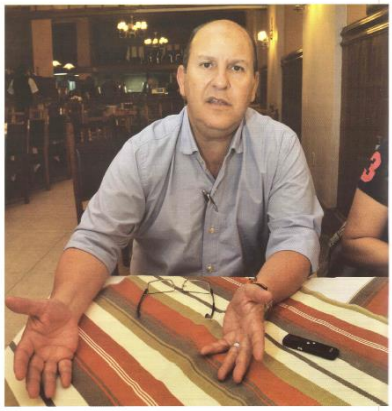
Pesquisa nacional sobre a qualidade da água

Na última quarta-feira, dia 04, o professor e doutor em Química da Universidade Federal do Paraná, Marco Tadeu Grassi, esteve Campos e, em entrevista exclusiva à equipe da Somos, adiantou alguns detalhes sobre uma pesquisa nacional de análise da água potável, desenvolvida pelo Instituto Nacional de Ciências e Tecnologias Analíticas Avançadas (INCTAA), sediado no Instituto de Química (IQ) da Unicamp em colaboração com outras instituições.

A pesquisa abrange 16 capitais do país e tem como objetivo avaliar os chamados compostos emergentes, que são compostos naturais ou sintéticos que podem ser provenientes de alguma ação antrópica, de algum processo natural como os hormônios naturais que expelimos, da contaminação pelo esgoto, lixo ...tivos químicos agrícolas. Esses com...emergentes ainda não são legislados ...taram a ser estudados recentemente.

...queremos levantar essa questão para ...seja discutida, para que possa haver ...entos em pesquisa para que permita ...nar os níveis seguros de exposição.

... suspeitas de que o consumo em ...razo poderia resultar em uma inci... de alguns tipos de câncer, poderia ...onsável por processos associados à ...lade, e, na verdade, não são só os ...ios que podem causar isso; quando ... em compostos emergentes, vários ...rferentes endócrinos, ou seja, eles ...mimetizar um hormônio (adotar ges...mas físicas do outro). Eles atuam de ... a desregular o funcionamento do ... endócrino. Isso pode se dar porque ...as endócrino é composto por várias ...s, cada uma dessas glândulas tem ...el muito definido e produz e excreta ...nte sanguínea os hormônios. Esses ...ios viajam no organismo e ao se li... receptores celulares eles deflagram ...o. Então os efeitos podem ser inúme...s compostos tanto podem mimetizar o comportamento e a função de um hormônio natural, quanto podem inibir, ou interferir de alguma forma no funcionamento dos sistemas endócrinos de organismos intactos", explicou o professor Grassi.



Todas as amostras apontaram falhas no tratamento

Os pesquisadores também identificaram a presença de cafeína em todas as 49 amostras coletadas no cano de entrada de água de residências espalhadas pelas cinco regiões do país. Esse dado é relevante, pois a cafeína funciona como uma espécie de marcador da eficiência das estações de tratamento de água. Ou seja, onde a cafeína, um micropoluente, está presente, há enorme probabilidade da presença de outros contaminantes. "No

Somos notícia

ano passado fizemos essa pesquisa em 16 capitais, mas ficaram faltando algumas importantes como Salvador, e nós tivemos 92% das amostras apresentando a cafeína. Nós não pegamos uma amostra de cada lugar, pegamos uma amostra de cada estação de tratamento que faz a distribuição da água", disse a doutora em química, Maria Cristina Canela, que também integra a pesquisa.

A água potável fornecida para as pessoas apresenta contaminação por substâncias ainda não legisladas, mas que podem ser potencialmente nocivas à saúde humana. "Nos contratos das concessionárias, eles não estão enquadrados a ter que purificar a água a esse ponto. As concessionárias estão muito preocupadas com os resultados da pesquisa, mas a gente não está dizendo que elas estão fora do padrão da legislação. O que nós queremos é colocar em discussão a legislação, porque esses compostos não devem estar presentes na água que nós bebemos", disse Cristina.

Tratamento insuficiente

O estudo demonstra que os mananciais estão contaminados por esgoto, e que as estações de tratamento não estão dando conta de remover a cafeína e outros compostos do produto que chega às torneiras das casas. "Outro aspecto é sobre as concessionárias que trabalham com base na legislação vigente, certamente, os processos de tratamento de água que são praticados hoje são muito eficientes no que diz respeito à remoção ou inativação de organismos causadores de doenças, os patógenos", disse Grassi.

Quem paga o tratamento é a população não a concessionária

"A princípio, a água tratada pela concessionária é considerada potável, mas, quando você vê a cafeína e outros compostos surgirem na água de abastecimento, significa que, do ponto de vista químico, ela representa uma impressão digital, não é mais microbiológica, é químico. E já existe tecnologia disponível hoje para se fazer um polimento na etapa de tratamento da água para que esses compostos possam ser removidos. Se essa tecnologia está disponível, por que não fazermos uso dela? Quem banca isso não é a concessionária, não sai da conta do prefeito, é a população que paga. Se tivermos que, num primeiro momento, bancar, que seja feito esse investimento, porque ele está num contexto de saúde pública. A população precisa se mobilizar, a sociedade civil precisa se organizar e cobrar, exigir esse direito. A intenção é que a legislação seja aprimorada e a partir daí as concessionárias tenham que lidar com essa questão num outro cenário", disse o professor Grassi.

Sobre um prévio resultado da pesquisa, Grassi declarou que os nossos rios, principalmente os urbanos, sofrem de um processo constante de degradação em função, principalmente, das deficiências de saneamento básico. "Esse foi o primeiro trabalho realizado no Brasil de forma padronizada, e já percebemos que, na região litorânea em todo o país, o esgoto muitas vezes é descartado para o mar, então, a reciclagem já não é tão grande, nas capitais e em região continental é diferente, os níveis são um pouco mais alto, isso está ligado, também, às práticas de despejo", finalizou Marco.

Várias universidades participam da pesquisa

A pesquisa de análise da água potável fornecida nas 16 capitais contou com a participação de 25 pesquisadores das seguintes instituições, além da Unicamp: Universidade de Brasília (UnB), Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Universidade Federal da Paraíba (UFPB), Universidade Estadual do Norte Fluminense (UENF) e Universidade Federal do Paraná (UFPR).

Após coletarem as amostras de água nas residências, seguindo o mesmo protocolo previamente estabelecido, os pesquisadores enviam as amostras à Unicamp, onde as análises químicas são realizadas.

"A lei brasileira estabelece que as concessionárias de água devem adotar métodos de polimento mais sofisticados contra substâncias potencialmente nocivas, mesmo que elas não estejam legisladas. Claro, é um investimento muito caro, mas uma possível epidemia pode custar ainda mais, trazendo sérias consequências e custos elevadíssimos ao Sistema Único de Saúde, encerrou o professor Grassi.

Jornal da Unicamp também fez alerta sobre contaminantes emergentes

A água potável fornecida em 16 capitais brasileiras e consumida por aproximadamente quarenta milhões de pessoas, apresenta contaminação por substâncias ainda não legisladas, que podem ser potencialmente nocivas à saúde humana.

Este resultado foi determinado através de uma pesquisa desenvolvida pelo Instituto Nacional de Ciências e Tecnologias Analíticas Avançadas, sediado no Instituto de Química da Unicamp, em colaboração com outras instituições.

Em notícia publicada em maio último, pelo jornal da Unicamp, os pesquisadores identificaram, por exemplo, a presença de cafeína em todas as 49 amostras coletadas no cavalete (cano de entrada) de residências espalhadas pelas cinco regiões do país.

Segundo o Prof. Wilson de Figueiredo Jardim, coordenador do Laboratório de Química Ambiental (LQA) do Instituto de Química da Unicamp, os dados referentes à existência de cafeína indicam que existem fortes possibilidades da presença de outros contaminantes na água de consumo.

Além de cafeína, os pesquisadores também encontraram nas amostras de atrazina (herbicida), fenolftaleína (laxante) e triclosan (substância presente em produtos de higiene pessoal).

Por não serem legislados, esses contaminantes emergentes – são emergentes não porque são novos, mas porque estão cada vez mais presentes no ambiente – não são monitorados com frequência.

Por outro lado, os cientistas ainda não sabem, ao certo, qual o limite de proteção ao ser humano e nem quais os efeitos deletérios que eles podem causar ao organismo humano, sabendo-se apenas que já existem estudos científicos que apontam que esses compostos têm causado sérios danos aos organismos aquáticos. Está comprovado, por exemplo, que eles podem provocar a feminização de peixes, alteração de desenvolvimento de moluscos e anfíbios e uma diminuição da fertilidade de aves.

Quanto aos humanos, segundo Wilson Jardim, há indícios de que os contaminantes não legislados, especialmente hormônios naturais e sintéticos – como o estrógeno -, podem provocar mudanças no sistema endócrino de homens e mulheres.

Uma hipótese, que carece ainda de maiores estudos, considera que esse tipo de contaminação poderia estar contribuindo para que a menarca (primeira menstruação) ocorra mais cedo entre as meninas.

"Estabelecer esse nexo causal é difícil. Entretanto, temos que estar atentos para problemas dessa ordem. Acredito que, com o tempo, os contaminantes emergentes também terão que ser legislados. O trabalho que estamos realizando tem por objetivo exatamente fornecer subsídios para a formulação de políticas públicas que possam assegurar à população o fornecimento de uma água potável de maior qualidade", refere Wilson Jardim no Jornal da Unicamp.

(Rui Sintra, jornalista, Jornal da Unicamp)

CRISTALINA E CONTAMINADA

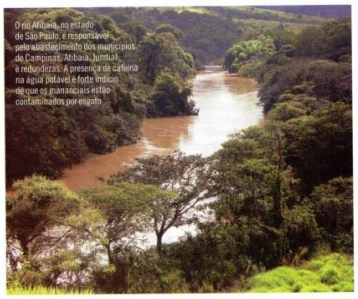
Água potável de capitais brasileiras contém substâncias que podem interferir no sistema hormonal

Você está com sede e abre a geladeira – mas acabou a água mineral. Tudo bem, a torneira está logo ao lado. Eis que lhe vem a clássica ponderação: pode-se mesmo tomar, sem preocupações, a água tratada da rede pública? Frescuras à parte, recente pesquisa da Universidade Estadual de Campinas (Unicamp) traz dados inquietantes acerca da qualidade de nossa água potável.

Foram coletadas 49 amostras em residências espalhadas por 16 capitais brasileiras. "Análises acusaram presença de cafeína em 92% das amostras de água", diz o coordenador do estudo, Wilson Jardim, do Instituto de Química da Unicamp. "A cafeína em si, nesse caso, não representa problema algum; mas ela nos diz muito sobre a eficiência das estações de tratamento: se há cafeína, é quase certo que encontraremos também outros contaminantes", explica.

Não deu outra. As amostras revelaram concentrações variadas de atrazina, fenolftaleína e triclosan. Mas que nomes estranhos são esses? Vamos por partes: atrazina é o princípio ativo de um perigoso herbicida, do qual generosas doses são aplicadas em nossas lavouras. Foi banido em 2004 na União Europeia por provocar contaminação do lençol freático. A fenolftaleína, por sua vez, era encontrada em medicamentos. Mas, no Brasil, sua comercialização foi proibida em 2002, pois, segundo a Agência Nacional de Vigilância Sanitária (Anvisa), estaria relacionada a quadros de carcinogênese. Já o triclosan talvez seja o vilão químico mais popular do momento. Não apenas por ser um antisséptico presente em boa parte de nossos cosméticos, mas também por estar na mira da Food and Drug Administration, agência que controla drogas e alimentos nos Estados Unidos, por seus temíveis efeitos toxicológicos.

A presença dessas substâncias na água potável, segundo os pesquisadores da Unicamp, é prova inequívoca de que os mananciais estão seriamente contaminados. E mais: as estações de tratamento são incapazes de remover o crescente número de compostos sintéticos que despejamos ininterruptamente em nossos esgotos. "Mais de 100 mil substâncias químicas artificiais fazem parte de nossa rotina hoje", contabiliza Jardim. Estudos indicam que, a cada ano, mais de 1.500 novos compostos são lançados no mercado – moléculas novas que entram em nosso cotidiano geralmente carecendo de prévios estudos toxicológicos e ambientais. Não é surpreendente, pois, que sejam absorvidas nos processos naturais de drenagem e contaminem, eventualmente, a água que abastece as cidades.



O rio Atibaia, no estado de São Paulo, é responsável pelo abastecimento dos municípios de Campinas, Atibaia, Jundiaí, a reduzidíssima presença da cafeína na água potável é forte indício de que os mananciais estão contaminados por esgoto

CONTAMINANTES EMERGENTES A boa notícia: há na legislação brasileira uma portaria específica (2.914/2011) para regulamentar a qualidade da água que verte de nossas torneiras. A má: os padrões sugeridos no documento vêm suscitando ressalvas por parte da comunidade científica. Afinal, a portaria limita-se a versar sobre características elementares de potabilidade – como composição bacteriológica, radioatividade, alcalinidade, dureza, turbidez, entre outros parâmetros. "Mas sabemos que existem hoje pelo menos 500 contaminantes ignorados pela legislação", preocupa-se Jardim.

É o caso dos tão comentados interferentes endócrinos. "São substâncias que imitam hormônios naturais do organismo", explica a farmacêutica Olivia Busch, do Departamento de Enfermagem e Saúde Pública da Universidade Estadual de Ponta Grossa (UEPG). Ela estudou a contaminação da principal represa que abastece a cidade de Curitiba (PR) e garante: "na capital paranaense, e provavelmente na maioria dos centros urbanos, os habitantes já bebem água com interferência endócrina".

Consequências? Possíveis distúrbios no sistema hormonal – com efeitos de longo prazo que variam da formação de tumores a malformações congênitas, passando por feminilização de machos (e vice-versa) ou mesmo disfunções cognitivas. A novidade – e esta é uma área de pesquisa ainda incipiente – é que tais substâncias estão sendo encontradas com cada vez mais frequência na água potável. Não só no Brasil, mas no mundo todo.

A lista de interferentes endócrinos é extensa. Eis alguns familiares exemplos: estireno (onipresente na indústria plástica e nos copos descartáveis), pentaclorofenol (usado em tintas e produtos para preservação de madeiras), fenilfenol (aplicado na fabricação de desinfetantes), ftalatos (usados em plastificantes, vernizes, cosméticos e inseticidas), dibenzenofurano policlorado (vinculado à produção de PVC e à queima de carvão ou diesel), bisfenol-A (presente no revestimento interno de alimentos enlatados), atrazina, endosulfan, paration (alguns dos agrotóxicos mais vendidos atualmente), entre dezenas de outros exemplos que podem contaminar – ou já contaminaram – os mananciais que abastecem a rede pública.

Para alguns, soa como mais uma das intermináveis preocupações capitaneadas por ambientalistas impertinentes. Mas, ao que tudo indica, não parece ser esse o caso. O problema, segundo Jardim, é que a ciência desconhece o limite seguro de exposição do ser humano aos interferentes endócrinos. "Já sabemos, no entanto, que tais contaminantes causam sérios danos a organismos aquáticos", lembra o químico da Unicamp. "Feminilização de peixes, alterações no desenvolvimento de moluscos e anfíbios e mesmo decréscimo de fertilidade em aves." Uma hipótese, que ainda carece de confirmação, sugere que, por conta desse quadro de contaminação ambiental, a menarca (primeira menstruação) ocorre cada vez mais cedo entre as meninas.

Pesquisadores coletam amostras de água potável. A pesquisa, liderada pela Unicamp, teve participação das universidades federais de Pernambuco (UFPE), do Paraná (UFPR), do Rio Grande do Sul (UFRGS) e da estadual do Norte Fluminense (UENF)

A propósito, o endocrinologista Richard Sharpe, da Universidade de Edimburgo, na Escócia, argumenta que a exposição a interferentes endócrinos se relaciona à crescente incidência de anormalidades reprodutivas também nos homens.

Em tempo: consumidores assíduos de água mineral não estão isentos desses contaminantes. "Água envasada em garrafas PET podem conter quantidades apreciáveis de ftalatos, que também são interferentes endócrinos", alerta Jardim, "e tais quantidades aumentam com o tempo de prateleira". Segundo alguns, a indústria de água envasada tenta a todo custo desacreditar a qualidade da água de abastecimento. "É o roto falando do esfarrapado." Mas afinal, que água podemos beber? Segundo Jardim, "filtros caseiros à base de carvão ativado podem ser úteis, mas exigem manutenção rigorosa, pois sem ela podem piorar o cenário".

Breve parêntese: pesquisadores também sinalizam alerta para a presença, na água, de nanomateriais sintéticos. A despeito de acenarem promissor horizonte tecnológico, compostos com formulações em escala nano – já comercializados em centenas de produtos no mercado global – ainda carecem de estudos que atestem segurança toxicológica. "Nanotubos de carbono, fulerenos, óxidos nanométricos são alguns exemplos", elenca o químico da Unicamp. O físico Andrew Maynard, da Universidade de Michigan, nos Estados Unidos, publicou um artigo na *Nature* (v. 444, novembro de 2006) argumentando que, "apesar de parecer exagero, tais preocupações não são infundadas".

CENÁRIO Das 16 capitais que fizeram parte do estudo, as campeãs foram São Paulo (SP) e Porto Alegre (RS), com mais de 100 ng/L de cafeína na água tratada. Em Belo Horizonte (MG), as amostras apresentaram entre 30 e 99 ng/L de cafeína. Em Palmas (TO) e Goiânia (GO), 10 e 29 ng/L. Capitais litorâneas, como Florianópolis (SC), Rio de Janeiro (RJ), Vitória (ES) e Recife (PE), registraram menores índices: abaixo dos 10 ng/L. O que é de fácil compreensão. Cidades costeiras despejam esgoto diretamente no mar. "Nelas, bebe-se água de melhor qualidade; porém, não se pode nadar", ironiza Jardim.

"Com o tempo, contaminantes emergentes terão de ser incluídos na legislação", prevê o químico da Unicamp. Na União Europeia, aliás, há movimentos nesse sentido. Agências responsáveis pelo abastecimento de água já estudam valores de referência para fármacos e hormônios. Nos Estados Unidos, a Agência de Proteção Ambiental segue o mesmo caminho. Enquanto isso, no Brasil, a discussão está apenas principiando. "Observamos a deterioração vertiginosa dos mananciais; e há pouco avanço na legislação e nas tecnologias de tratamento", lamenta Jardim. Uma boa notícia, porém: a Sociedade de Abastecimento de Água e Saneamento, em Campinas, parece estar se preparando para adotar tecnologias capazes de melhorar a qualidade da água no município; outras concessionárias paulistas também iniciaram diálogos com a equipe da Unicamp. A Associação Brasileira de Engenharia Sanitária e Ambiental mostra-se atenta à questão dos contaminantes endócrinos; e deve logo propor aperfeiçoamento à lei que regulamenta a qualidade de nossas águas.

Mas, analisando a problemática em perspectiva, Busch argumenta que o mero aprimoramento das tecnologias de purificação da água não será o bastante. "De nada adiantarão tratamentos sofisticados, que encarecerão o custo da água, se os poluidores continuarem a poluir". Para a pesquisadora da UEPG, será por demais oneroso implementar tratamentos tão apurados para um sem-número de substâncias que contaminam os mananciais e demais cursos d'água. "Seria atuar somente na consequência, e não na causa da poluição". Disciplinar a indústria – regulando e monitorando as substâncias químicas utilizadas principalmente nos setores de fármacos e cosméticos – é fundamental, segundo a pesquisadora.

O raciocínio de Busch nos remete à gênese da problemática: há, na verdade, uma dinâmica social que antecede tais preocupações. "Por que, afinal, estamos a discutir o problema dos contaminantes emergentes?", indaga Jardim. "Porque, ao mesmo tempo em que temos hoje uma capacitação analítica muito aprimorada, que nos permite detectar grandezas da ordem dos nanogramas por litro, vivenciamos um quadro de adensamento populacional sem precedentes associado a novos padrões de consumo", contextualiza o químico. "Na sétima economia do mundo, há um descompasso entre a riqueza que se apregoa e um saneamento precário", critica (ver 'Saneamento tupiniquim'). "Consumimos como europeus; pagamos impostos como escandinavos; mas, no quesito saneamento, somos praticamente um país africano."

HENRIQUE KUGLER | *CIÊNCIA HOJE* | RJ

Saneamento tupiniquim

Foi lançado em 2012 o primeiro *Diagnóstico da água nas Américas*, editado, em inglês e espanhol, pela Rede Interamericana de Academias de Ciências (Ianas), da qual a Academia Brasileira de Ciências (ABC) faz parte. "É a primeira compilação independente feita pela comunidade científica, sem a intervenção de governos, sobre a situação atual dos recursos hídricos nas Américas", diz o ecólogo e limnólogo José Tundisi, um dos organizadores da publicação. O panorama, segundo ele, é pouco animador. Excetuando-se Estados Unidos, Canadá e Cuba, todos os demais países americanos apresentam problemas sérios de saneamento básico e gestão de águas.

No Brasil, segundo o Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE), ainda há 2.495 cidades sem esgoto sanitário – ou seja, metade dos municípios do país. "Estamos fazendo nossa parte? Não, não estamos", critica Tundisi. "Falta aproximação entre gestores e academia". Há, no entanto, uma interessante tendência na América Latina pela descentralização da gerência sobre os recursos hídricos – ideia que, no Brasil, vem se materializando com os chamados Comitês de Bacias Hidrográficas. O objetivo é que a sociedade civil participe ativamente nos processos decisórios sobre políticas hídricas em cada região. Novo estudo da Ianas, a ser publicado nos próximos meses, irá detalhar a situação das águas urbanas no continente.