

Estudo do perfil de contaminação de microcontaminantes orgânicos em água natural por SPE-LCMS e mapas auto-organizáveis.

Ananda L. Sanson¹ (PG), Nathália de L. Ferreira¹ (IC), Júlio C. C. da Silva¹ (PG), Lumena C. Mendes¹ (IC), Robson J. de C. F. Afonso¹ (PQ), Maurício X. Coutrim¹ (PQ), Tiago P. Trindade² (PQ), Reinaldo F. Teófilo³ (PQ), Gilmare A. da Silva^{1*} (PQ). **gilmare@iceb.ufop.br*

¹Dep. de Química – Univ. Federal de Ouro Preto (UFOP), Campus Morro do Cruzeiro, s/n, 35400-000, Ouro Preto-MG.

²Companhia de Saneamento Ambiental do Distrito Federal, Av. Sibiruna, L. 13/21, s/n, 71928-720, Águas Claras-DF.

³Dep. de Química – Univ. Federal de Viçosa (UFV), Avenida Peter Henry Rolfs, s/n, 36570-000, Viçosa-MG.

Palavras Chave: Micropoluentes, SPE-LCMS, Rede de Kohonen.

Introdução

Recentemente considerável atenção tem sido dada à avaliação de micropoluentes ambientais em ambientes aquáticos, devido às sérias implicações à saúde humana e ao meio ambiente. Muitos desses compostos tem reconhecida capacidade de imitar ou antagonizar efeitos hormonais. Em águas contaminadas são usualmente encontrados na ordem de $\mu\text{g.L}^{-1}$ e ng.L^{-1} , o que demanda técnicas sensíveis e exatas em suas determinações. A cromatografia líquida acoplada à espectrometria de massas (LCMS) se apresenta como uma das mais promissoras.¹

Assim, este trabalho propõe a determinação de alguns microcontaminantes orgânicos em amostras de água bruta natural usando extração em fase sólida (SPE) e LCMS, com as amostras coletadas nos períodos chuvoso e de estiagem, em duas profundidades. Para ser possível a interpretação prática e adequada dos dados foi utilizada a rede neural de Kohonen,² uma ferramenta quimiométrica de análise exploratória.

Resultados e Discussão

Foram coletadas amostras em cinco pontos (A, B, C, D e E) do corpo d'água e em duas profundidades (P1 – 1m e P2 – 10m), em duplicata, nos meses de outubro, novembro e dezembro (período chuvoso); e, no ano seguinte, a coleta foi feita nos meses de julho, agosto e setembro (período de estiagem). Nos meses de novembro e julho ocorreram coletas na primeira (q1) e segunda (q2) quinzenas.

As amostras de água foram filtradas e acidificadas e os compostos cafeína (caf), bisfenol A (bisf) e dietilftalato (dietil) extraídos por SPE. Em seguida as amostras foram analisadas no equipamento LCMS-IT-TOF (ion-trap - time-of-flight) / Shimadzu 20A. A menor concentração para quantificação (LQ) pela metodologia analítica utilizada foi 5 ng.L^{-1} .

As concentrações obtidas foram organizadas em uma matriz de dados e avaliadas pela rede de Kohonen, que apresentou arquitetura otimizada com 49 neurônios. Por meio do mapa das amostras (Figura 1(a)) é possível apontar quais delas se

assemelham em termos das concentrações dos compostos analisados, simultaneamente. Também, é possível inferir sobre essas similaridades considerando o ponto e profundidade de coleta.

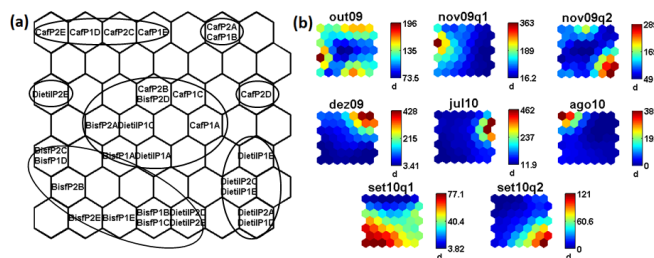


Figura 1. (a) Perfil de distribuição das amostras. (b) Mapas da distribuição dos meses monitorados.

Relacionando a distribuição das amostras (Figura 1(a)) com os mapas da Figura 1(b), pode-se inferir sobre o perfil de contaminação ao longo dos meses de coleta, e também identificar os meses com os maiores valores de concentração, considerando os parâmetros de coleta.

A amostra DietilP2B, por exemplo, foi alocada separadamente das demais por apresentar a maior concentração de dietilftalato, no ponto B e à profundidade 2 de coleta. Nenhum outro composto/ponto de coleta apresentou concentração similar na primeira quinzena do mês de novembro.

Conclusões

Pela técnica quimiométrica utilizada foi possível avaliar o perfil de contaminação de micropoluentes orgânicos determinados por SPE-LCMS, em função das variáveis de coleta sazonalidade, ponto e profundidade de amostragem. Sem o uso da abordagem multivariada, fatalmente a interpretação dos dados não seria objetiva e nem conclusiva.

Agradecimentos

CAPES, FAPEMIG, FINEP e UFOP.

¹ Bila, D. M.; Dezotti, M. *Quim. Nova* **2007**, 30, 651.

² Melssen, W. J.; Smits, J. R. M.; Buydens, G. K. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **1994**, 23, 267.