

MATERIAL SUPLEMENTAR

Avaliação da concentração total e da fração bioacessível de metais em amostras de casca de uva de cultivares Tannat e Cabernet Sauvignon por MIP OES

Bruno Jacobs^a, Daisa Hakbart Bonemann^a, Camila Corrêa Pereira^a, Alexander Ossanes de Souza^a, Ana Claudia Beduhn Luckow^a, Meibel Teixeira Lisboa^a, Anderson Schwingel Ribeiro^a, Solange Cadore^b e Adriane Medeiros Nunes^{a,*}, 

^aCentro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Universidade Federal de Pelotas, 96050-500 Capão do Leão – RS, Brasil

^bInstituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, 13083-970 Campinas – SP, Brasil

*e-mail: adriane.mn@hotmail.com

Tabela 1S. Condições operacionais de trabalho para determinação dos analitos por MIP OES

Analito	Comprimento de onda (nm)	Posição de visualização do plasma (mm)	Vazão de nebulização (L min ⁻¹)
Ba	455,403	-10	1,00
Bi	306,772	0	0,65
Ca	393,366	10	0,60
Cd	228,802	10	0,55
Co	340,512	0	0,65
Cr	425,433	-10	0,95
Cu	324,754	0	0,60
Fe	371,993	0	0,75
K	766,491	10	1,00
Mn	403,076	0	0,85
Pb	405,781	-10	0,70
Zn	213,857	0	0,55

Tabela 2S. Concentração dos reagentes utilizados nas soluções do sistema digestivo

Reagentes	Concentração	Reagentes	Concentração
KCl	37,3 g L ⁻¹	CaCl ₂ (H ₂ O) ₂	7,5 mmol L ⁻¹
KH ₂ PO ₄	34,0 g L ⁻¹	CaCl ₂ (H ₂ O) ₂	2,0 mmol L ⁻¹
NaHCO ₃	84,0 g L ⁻¹	CaCl ₂ (H ₂ O) ₂	9,0 mmol L ⁻¹
NaCl	117,0 g L ⁻¹	NaOH	1 mol L ⁻¹
MgCl ₂ (H ₂ O) ₆	15,25 g L ⁻¹	HCl	6,0 mol L ⁻¹
(NH ₄) ₂ CO ₃	12,0 g L ⁻¹	HCl	1,0 mol L ⁻¹
CaCl ₂ (H ₂ O) ₂	12,0 g L ⁻¹		

Tabela 3S. Parâmetros de mérito para determinação da concentração total dos analitos por MIP OES

Analito	a (L mg ⁻¹)	R ²	LD _(m) (mg kg ⁻¹)	LQ _(m) (mg kg ⁻¹)
Ba	174,02	0,998	0,0014	0,0046
Bi	802,34	0,999	0,0086	0,028
Ca	165,77	0,993	0,171	0,564
Cd	24,98	0,999	0,045	0,15
Co	26,18	0,994	0,081	0,267
Cr	38,05	0,999	0,0043	0,014
Cu	166,52	0,999	0,018	0,059
Fe	13,90	0,999	0,095	0,314
K	28,74	0,999	0,167	0,551
Mn	51,44	0,999	0,0038	0,012
Pb	7,05	0,994	0,045	0,15
Zn	25,54	0,991	0,221	0,729

a : coeficiente de correlação angular da curva; R²: coeficiente de correlação linear ao quadrado; LD_(m): limite de detecção do método; LQ_(m): limite de quantificação do método.

Tabela 4S. Parâmetros de mérito da fração bioacessível dos analitos por MIP OES

Analito	a (L mg ⁻¹)	R ²	LD _(m) (mg kg ⁻¹)	LQ _(m) (mg kg ⁻¹)
Ba	408,80	0,999	0,002	0,007
Cu	171,50	0,999	0,122	0,403
Fe	11,79	0,995	0,208	0,686
Mn	53,92	0,999	0,086	0,284
Pb	6,13	0,999	0,112	0,369
Zn	22,65	0,998	0,079	0,261

a : coeficiente de correlação angular da curva; R²: coeficiente de correlação linear ao quadrado; LD_(m): limite de detecção do método; LQ_(m): limite de quantificação do método.

Tabela 5S. Resultados obtidos do teste de adição e recuperação da concentração total em amostras de casca de uva

Concentração (mg kg ⁻¹)			Concentração (mg kg ⁻¹)			Concentração (mg kg ⁻¹)					
Analito			Analito			Analito					
	Adição ^a	Tannat ^b	Rec ^c		Adição ^a	Tannat ^b	Rec ^c				
Ba	0	5,72 ± 0,22 (3,8)	-	Cr	0	< 0,0043	-	Pb	0	0,51 ± 0,03 (5,9)	-
	0,8	6,59 ± 0,11 (1,7)	109		0,8	0,96 ± 0,05 (5,2)	120		0,8	1,25 ± 0,05 (4,0)	92
	1,6	7,00 ± 0,26 (3,7)	80		1,6	1,641 ± 0,003 (0,2)	103		1,6	1,82 ± 0,04 (2,2)	82
	2,4	8,11 ± 0,06 (0,7)	100		2,4	2,59 ± 0,04 (1,5)	108		2,4	2,62 ± 0,05 (1,9)	88
Bi	0	< 0,0086	-	Cu	0	3,59 ± 0,15 (4,2)	-	Zn	0	1,72 ± 0,03 (1,7)	-
	0,8	0,66 ± 0,04 (6,1)	82		0,8	4,46 ± 0,06 (1,3)	109		0,8	2,58 ± 0,01 (0,4)	108
	1,6	1,36 ± 0,04 (2,9)	85		1,6	5,38 ± 0,03 (0,5)	112		1,6	3,24 ± 0,13 (4,0)	95
	2,4	2,02 ± 0,05 (2,5)	84		2,4	6,24 ± 0,07 (1,1)	110		2,4	4,22 ± 0,06 (1,4)	104
Ca	0	105 ± 3 (2,8)	-	Fe	0	7,4 ± 0,3 (4,0)	-				
	56	161 ± 2 (1,2)	100		4,4	11,1 ± 0,2 (1,8)	84				
	112	206 ± 5 (2,4)	90		8,8	15,7 ± 0,9 (5,7)	94				
	168	290 ± 19 (6,5)	110		12,4	17,9 ± 0,3 (1,7)	85				
Cd	0	< 0,045	-	K	0	3991 ± 105 (2,6)	-				
	0,8	0,67 ± 0,03 (4,5)	84		1600	5782 ± 84 (1,4)	112				
	1,6	1,34 ± 0,01 (0,7)	84		3200	7798 ± 173 (2,2)	119				
	2,4	2,18 ± 0,01 (0,5)	91		4800	9721 ± 190 (1,9)	119				
Co	0	0,79 ± 0,01 (1,3)	-	Mn	0	2,21 ± 0,20 (9,0)	-				
	0,8	1,47 ± 0,03 (2,0)	85		0,8	3,15 ± 0,09 (2,8)	118				
	1,6	2,15 ± 0,07 (3,2)	85		1,6	3,79 ± 0,03(0,8)	99				
	2,4	2,89 ± 0,05 (1,7)	88		2,4	4,94 ± 0,06 (1,2)	114				

^a mg kg⁻¹; ^b mg kg⁻¹ ± desvio padrão (RSD); ^c Recuperação (%).

Tabela 6S. Avaliação da exatidão do método de preparo de amostra proposto por comparação com sistema fechado de alta pressão

Analito	Concentração (mg kg ⁻¹)	
	Decomposição ácida – Sistema de refluxo (Método Proposto)	Decomposição ácida – Sistema Fechado (Método Comparativo)
Ba	5,72 ± 0,22 (3,8)	5,18 ± 0,11 (2,1)
Bi	< 0,0086	< 0,0086
Ca	105 ± 3 (2,8)	99 ± 3 (3,0)
Cd	< 0,045	< 0,045
Co	0,79 ± 0,01 (1,3)	< 0,081
Cr	< 0,0043	< 0,043
Cu	3,59 ± 0,15 (4,2)	3,02 ± 0,28 (9,3)
Fe	7,4 ± 0,3 (4,0)	7,3 ± 0,5 (6,8)
K	3991 ± 105 (2,6)	3908 ± 59 (1,5)
Mn	2,21 ± 0,20 (9,0)	1,95 ± 0,02 (1,0)
Pb	0,51 ± 0,03 (5,9)	< 0,045
Zn	1,72 ± 0,03 (1,7)	2,08 ± 0,14 (6,7)

Média ± desvio padrão (RSD).