

# O ensino e a pesquisa em **QU** **MICA**

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua  
(Organizador)

3

  
Atena  
Editora  
Ano 2021

# O ensino e a pesquisa em **QU** **MICA**

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua  
(Organizador)

**3**

  
Ano 2021

**Editora chefe**

Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira

**Editora executiva**

Natalia Oliveira

**Assistente editorial**

Flávia Roberta Barão

**Bibliotecária**

Janaina Ramos

**Projeto gráfico**

Camila Alves de Cremo

Daphynny Pamplona

Gabriel Motomu Teshima

Luiza Alves Batista

Natália Sandrini de Azevedo

**Imagens da capa**

iStock

**Edição de arte**

Luiza Alves Batista

2021 by Atena Editora

Copyright © Atena Editora

Copyright do texto © 2021 Os autores

Copyright da edição © 2021 Atena Editora

Direitos para esta edição cedidos à Atena Editora pelos autores.

Open access publication by Atena Editora



Todo o conteúdo deste livro está licenciado sob uma Licença de Atribuição Creative Commons. Atribuição-Não-Comercial-Não-Derivativos 4.0 Internacional (CC BY-NC-ND 4.0).

O conteúdo dos artigos e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva dos autores, inclusive não representam necessariamente a posição oficial da Atena Editora. Permitido o *download* da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos aos autores, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

Todos os manuscritos foram previamente submetidos à avaliação cega pelos pares, membros do Conselho Editorial desta Editora, tendo sido aprovados para a publicação com base em critérios de neutralidade e imparcialidade acadêmica.

A Atena Editora é comprometida em garantir a integridade editorial em todas as etapas do processo de publicação, evitando plágio, dados ou resultados fraudulentos e impedindo que interesses financeiros comprometam os padrões éticos da publicação. Situações suspeitas de má conduta científica serão investigadas sob o mais alto padrão de rigor acadêmico e ético.

**Conselho Editorial****Ciências Exatas e da Terra e Engenharias**

Prof. Dr. Adélio Alcino Sampaio Castro Machado – Universidade do Porto

Profª Drª Ana Grasielle Dionísio Corrêa – Universidade Presbiteriana Mackenzie

Prof. Dr. Carlos Eduardo Sanches de Andrade – Universidade Federal de Goiás

Profª Drª Carmen Lúcia Voigt – Universidade Norte do Paraná

Prof. Dr. Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás

Prof. Dr. Douglas Gonçalves da Silva – Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia

Prof. Dr. Eloi Rufato Junior – Universidade Tecnológica Federal do Paraná



Profª Drª Érica de Melo Azevedo – Instituto Federal do Rio de Janeiro

Prof. Dr. Fabrício Menezes Ramos – Instituto Federal do Pará

Profª Dra. Jéssica Verger Nardeli – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho

Prof. Dr. Juliano Carlo Rufino de Freitas – Universidade Federal de Campina Grande

Profª Drª Luciana do Nascimento Mendes – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Norte

Prof. Dr. Marcelo Marques – Universidade Estadual de Maringá

Prof. Dr. Marco Aurélio Kistemann Junior – Universidade Federal de Juiz de Fora

Profª Drª Neiva Maria de Almeida – Universidade Federal da Paraíba

Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte

Profª Drª Priscila Tessmer Scaglioni – Universidade Federal de Pelotas

Prof. Dr. Sidney Gonçalo de Lima – Universidade Federal do Piauí

Prof. Dr. Takeshy Tachizawa – Faculdade de Campo Limpo Paulista



## O ensino e a pesquisa em química 3

**Diagramação:** Camila Alves de Cremo  
**Correção:** Yaidy Paola Martinez  
**Indexação:** Amanda Kelly da Costa Veiga  
**Revisão:** Os autores  
**Organizador:** Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua

### Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

E59 O ensino e a pesquisa em química 3 / Organizador  
Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua. – Ponta Grossa -  
PR: Atena, 2021.

Formato: PDF  
Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader  
Modo de acesso: World Wide Web  
Inclui bibliografia  
ISBN 978-65-5983-761-8  
DOI: <https://doi.org/10.22533/at.ed.618210612>

1. Química - Estudo e ensino. I. Paniagua, Cleiseano  
Emanuel da Silva (Organizador). II. Título.

CDD 540.7

Elaborado por Bibliotecária Janaina Ramos – CRB-8/9166

**Atena Editora**  
Ponta Grossa – Paraná – Brasil  
Telefone: +55 (42) 3323-5493  
[www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br)  
contato@atenaeditora.com.br



**Atena**  
Editora  
Ano 2021

## DECLARAÇÃO DOS AUTORES

Os autores desta obra: 1. Atestam não possuir qualquer interesse comercial que constitua um conflito de interesses em relação ao artigo científico publicado; 2. Declaram que participaram ativamente da construção dos respectivos manuscritos, preferencialmente na: a) Concepção do estudo, e/ou aquisição de dados, e/ou análise e interpretação de dados; b) Elaboração do artigo ou revisão com vistas a tornar o material intelectualmente relevante; c) Aprovação final do manuscrito para submissão.; 3. Certificam que os artigos científicos publicados estão completamente isentos de dados e/ou resultados fraudulentos; 4. Confirmam a citação e a referência correta de todos os dados e de interpretações de dados de outras pesquisas; 5. Reconhecem terem informado todas as fontes de financiamento recebidas para a consecução da pesquisa; 6. Autorizam a edição da obra, que incluem os registros de ficha catalográfica, ISBN, DOI e demais indexadores, projeto visual e criação de capa, diagramação de miolo, assim como lançamento e divulgação da mesma conforme critérios da Atena Editora.



## DECLARAÇÃO DA EDITORA

A Atena Editora declara, para os devidos fins de direito, que: 1. A presente publicação constitui apenas transferência temporária dos direitos autorais, direito sobre a publicação, inclusive não constitui responsabilidade solidária na criação dos manuscritos publicados, nos termos previstos na Lei sobre direitos autorais (Lei 9610/98), no art. 184 do Código Penal e no art. 927 do Código Civil; 2. Autoriza e incentiva os autores a assinarem contratos com repositórios institucionais, com fins exclusivos de divulgação da obra, desde que com o devido reconhecimento de autoria e edição e sem qualquer finalidade comercial; 3. Todos os e-book são *open access*, *desta forma* não os comercializa em seu site, sites parceiros, plataformas de *e-commerce*, ou qualquer outro meio virtual ou físico, portanto, está isenta de repasses de direitos autorais aos autores; 4. Todos os membros do conselho editorial são doutores e vinculados a instituições de ensino superior públicas, conforme recomendação da CAPES para obtenção do Qualis livro; 5. Não cede, comercializa ou autoriza a utilização dos nomes e e-mails dos autores, bem como nenhum outro dado dos mesmos, para qualquer finalidade que não o escopo da divulgação desta obra.



## APRESENTAÇÃO

O e-book: “O ensino e a pesquisa em química 3” é constituído por quinze capítulos que foram organizados em três grandes áreas temáticas, a saber: *i)* ensino de química: processos formativos e a importância de atividades experimentais contextualizadas; *ii)* preparo de materiais metálicos e síntese aplicada ao desenvolvimento de materiais, substâncias com propriedades biológicas e bicomustíveis e; *iii)* avaliação e monitoramento da qualidade dos recursos hídricos.

O primeiro tema é composto por sete capítulos de livro que procuraram investigar a importância do aprendizado de conceitos técnico-científicos e de atividades experimentais para o melhor aprendizado do estudante do ensino médio na área de química. O desenvolvimento de atividades de extensão voltado para o contexto social possibilitou um maior aprendizado da química por intermédio da interdisciplinaridade com outras áreas da ciência e o desenvolvimento de uma consciência ambiental, a princípio, dentro do contexto escolar e que poderá ser disseminado por toda a sociedade a fim de se atingir uma maior conscientização coletiva, proporcionando a mudança em ações e atitudes que levam a consequências negativas para o meio ambiente e retorna a espécie humana com inúmeras consequências negativas.

A segunda temática é composta por cinco capítulos que apresentaram estudos voltados para o preparo de barras utilizando a técnica de Extração por sorção em barra de agitação (SBSE), visando aumentar a inércia química e, conseqüentemente, reduzir o processo de corrosão metálica e aumentando a vida útil deste material. Os outros quatro capítulos apresentaram processos de reação de síntese com o intuito de produzir nanomateriais enriquecidos com biomassa de origem vegetal; produção de quinolina para combater a Leishmaniose que é uma doença parasitária muito presente em países tropicais como o Brasil; a síntese da 2-metilrilquinonas com elevada propriedades biológicas que podem vir a ser utilizadas na química medicinal. Por fim a reação de síntese e avaliação de um eletrocatalisador com um enorme potencial para ser utilizado em células de combustíveis para aplicação na produção de bioetanol.

O terceiro e último tema é composto por três capítulos de livro com estudos que procuraram avaliar a degradação de biodiesel utilizando processos em condições anaeróbicas; a distribuição de gás metano presente no sedimento da superfície do Lago Paranoá em Brasília. Por último, um estudo realizado e coordenado por pesquisadores da Universidade de Brasília, que objetiva a possibilidade de monitorar o uso de drogas ilícitas por meio da excreção de usuários na rede de esgoto domiciliar.

Nesta perspectiva, a Atena Editora vem trabalhando com o intuito de estimular e incentivar os pesquisadores brasileiros e de outros países a publicarem seus trabalhos com garantia de qualidade e excelência em forma de livros e capítulos de livros que são disponibilizados no site da Editora e em outras plataformas digitais com acesso gratuito.

## SUMÁRIO

### **CAPÍTULO 1..... 1**

APRESENTAÇÃO DOS CONCEITOS DE ÁCIDOS E BASES DE ARRHENIUS POR MEIO DA INVESTIGAÇÃO DAS CONCEPÇÕES ALTERNATIVAS DE ESTUDANTES DO ENSINO MÉDIO EM INSTITUIÇÕES PÚBLICAS DE ENSINO NOS ESTADOS DO ACRE E AMAZONAS

Leandro Junior Machado

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.6182106121>

### **CAPÍTULO 2..... 12**

A QUÍMICA NO ENSINO MÉDIO: VIDEOAULAS EXPERIMENTAIS COMO FERRAMENTAS NO ENSINO REMOTO

Oswaldo Pacheco Freitas

Ludimila Barbosa dos Santos

Jéssica Del Nero

Deise Ane Oliveira Silva

Mírian da Silva Costa Pereira

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.6182106122>

### **CAPÍTULO 3..... 26**

A INFLUÊNCIA DE ATIVIDADES EXPERIMENTAIS NO CONTEÚDO DE OXIRREDUÇÃO PARA O 2º ANO DO ENSINO MÉDIO

Fernanda Meneses Amaral

Maria Sorileide Costa Teixeira

Rothchild Sousa de Moraes Carvalho Filho

Antônia Flávia Silva Magalhães

Maria Tamires Cordeiro Pereira

Maria Fabiana Araujo da Silva

Ana Kerly Oliveira de Brito

Patrícia Teixeira da Silva

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.6182106123>

### **CAPÍTULO 4..... 42**

FABRICAÇÃO DE SABÃO ECOLÓGICO E ARTESANAL NO ALTO SERTÃO PARAIBANO: CONSCIÊNCIA AMBIENTAL ALIADA AO ENSINO DE QUÍMICA

José Manuel Amancio da Silva

Francisco Ferreira Batista

Lucas Ferreira Batista

Maíre Gomes de Meneses

José Iran Filho

Éricka Anulina Cunha de Oliveira

Pedro Nogueira da Silva Neto

Polyana de Brito Januário

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.6182106124>

**CAPÍTULO 5.....53**

**RECICLAGEM DE RESÍDUOS SÓLIDOS EM UM COLÉGIO DA REDE ESTADUAL NA CIDADE DE PEDRO II- PIAUÍ: UM RELATO DE EXPERIÊNCIA**

Fernanda Meneses Amaral  
Maria Sorileide Costa Teixeira  
Rothchild Sousa de Moraes Carvalho Filho  
Renata da Silva Carneiro  
João Breno Barros da Silva  
Larissa Viana Souza  
Ana Karina Borges Costa  
Hisley Feitosa Meneses  
Aline Maria da Silva Duarte  
Heloisa de Sousa Pereira

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.6182106125>

**CAPÍTULO 6.....61**

**ESTUDO COMPARATIVO ENTRE PIGMENTOS RUPESTRES DE SÍTIOS ARQUEOLÓGICOS DE INHUMA (PIAUÍ) POR MEIO DA ESPECTROMETRIA DE FLUORESCÊNCIA DE RAIOS X PORTÁTIL ALIADA A TRATAMENTO QUIMIOMÉTRICO**

Jacira Izidório de Moura  
Maria Conceição S. M. Lage  
Benedito Batista Farias Filho  
Wilkins Oliveira de Barros  
Anna Luiza Bizerra de Brito  
Luanne Miranda Lustosa

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.6182106126>

**CAPÍTULO 7.....78**

**A IMPORTÂNCIA DA ALFABETIZAÇÃO/LETRAMENTO CIENTÍFICO EM QUÍMICA PARA ESTUDANTES DA EDUCAÇÃO BÁSICA, CURSOS DE LICENCIATURA E PROFESSORES EM FORMAÇÃO CONTINUADA**

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua  
Anelise dos Santos Mendonça Soares  
Valdinei de Oliveira Santos

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.6182106127>

**CAPÍTULO 8.....91**

**PREPARO DE BARRAS PARA SBSE SOBRE SUBSTRATO METÁLICO MAGNETIZÁVEL DE ALTA INÉRCIA**

José Carlos Rodrigues  
Fernanda Maria Rodriguez

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.6182106128>

**CAPÍTULO 9.....107**

**SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE NANOPARTÍCULAS DE OURO REDUZIDAS COM CASCA DE ROMÃ (*Punica granatum* L.)**

Rafaela Spessemille Valotto

Wanderson Juvencio Keijok  
Marco Cesar Cunegundes Guimarães

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.6182106129>

**CAPÍTULO 10..... 117**

SÍNTESES DE ANALOGOS QUINOLÍNICOS CON ACTIVIDAD LEISHMANICIDA *IN VITRO*  
SOBRE *Leishmania (Viannia) panamensis*

Gilmar Gabriel Santafé Patiño

Fernis José Marin Severiche

Sara María Robledo Restrepo

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.61821061210>

**CAPÍTULO 11 ..... 132**

SÍNTESE DE 2-METOXIARIL ALQUINONAS E AVALIAÇÃO DE SUA REATIVIDADE EM  
REAÇÃO DE CICLIZAÇÃO ELETROFÍLICA

Angélica Ribeiro Claus

Daniela Aline Barancelli

Estela dos Reis Crespan

Letícia Ledo Marciniuk

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.61821061211>

**CAPÍTULO 12..... 143**

SÍNTESES Y EVALUACIÓN DEL ELECTROCATALIZADOR  $Pt/Al_2O_3/C$  PARA SU FUTURA  
APLICACIÓN EN CELDAS DE COMBUSTIBLE DE BIO-ETANOL DIRECTO

Nallely Téllez Méndez

Sergio Alberto Gamboa Sánchez

Laura Alicia Paniagua Solar

José Fermi Guerrero Castellanos

Enrique de la Fuente Morales

Beatriz Eugenia Graniel García

Jorge Cotzomi Paleta

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.61821061212>

**CAPÍTULO 13..... 154**

AVALIAÇÃO DA DEGRADAÇÃO DE BIODIESEL EM PROCESSO ANAERÓBIO

Marina Sayuri Kashiwabara

Patrícia Angélica Vieira

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.61821061213>

**CAPÍTULO 14..... 167**

DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DE METANO NOS SEDIMENTOS SUPERFICIAIS DO LAGO  
PARANOÁ, BRASÍLIA-DF

Valéria Regina Bellotto

Fernanda Vasconcelos de Almeida

Nickolas Valcarcel da Silva

Thiago Bezerra Lima

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.61821061214>

**CAPÍTULO 15..... 178**

EPIDEMIOLOGIA BASEADA NO ESGOTO PARA ESTIMAR O USO DE DROGAS:  
CONTRIBUIÇÕES DA QUÍMICA ANALÍTICA PARA A SOCIEDADE

Fernando Fabriz Sodré

Rafael Silva Feitosa

Alex de Sene Corado Guedes

Adriano Otávio Maldaner

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.61821061215>

**SOBRE O ORGANIZADOR..... 201**

**ÍNDICE REMISSIVO..... 202**

## EPIDEMIOLOGIA BASEADA NO ESGOTO PARA ESTIMAR O USO DE DROGAS: CONTRIBUIÇÕES DA QUÍMICA ANALÍTICA PARA A SOCIEDADE

*Data de aceite: 01/12/2021*

*Data de submissão: 20/07/2021*

### **Fernando Fabriz Sodré**

Universidade de Brasília, Instituto de Química  
Brasília – DF  
<http://lattes.cnpq.br/5464023129390042>

### **Rafael Silva Feitosa**

Universidade de Brasília, Instituto de Química  
Brasília – DF  
<http://lattes.cnpq.br/2296154154165296>

### **Alex de Sene Corado Guedes**

Universidade de Brasília, Instituto de Química  
Brasília – DF  
<http://lattes.cnpq.br/0003215653872455>

### **Adriano Otávio Maldaner**

Instituto Nacional de Criminalística, Polícia  
Federal  
Brasília – DF  
<http://lattes.cnpq.br/7421096523152034>

**RESUMO:** Resíduos de drogas de abuso e de seus produtos de metabolização surgem no esgoto em função do estilo de vida das sociedades modernas. Mediante o desenvolvimento e a aplicação de sequências analíticas completas para quantificar tais substâncias-traço no esgoto, torna-se possível estimar o consumo de drogas de abuso por uma população de maneira empírica, eticamente não-invasivas e em tempo real. Essa estratégia, denominada epidemiologia baseada no esgoto (EBE), tem sido empregada em

vários países para complementar dados obtidos por entrevistas, pesquisas epidemiológicas, censos, internações, apreensões e prescrições médicas. Tem sido possível ainda produzir dados geolocalizados e temporais relacionados às dinâmicas do uso de diferentes drogas, como cocaína, maconha, anfetaminas, opioides e estimulantes, além do álcool, de novas drogas sintéticas e de medicamentos controlados. A EBE também tem sido usada para investigar a exposição de comunidades a poluentes químicos, como agrotóxicos, produtos de limpeza e de higiene pessoal, e a doenças infecciosas, como a COVID-19. Este trabalho busca divulgar as potencialidades da EBE, bem como as contribuições da química analítica para a produção de informações que podem subsidiar ações estruturais em segurança pública, educação, saúde e bem-estar da sociedade.

**PALAVRAS-CHAVE:** Análise química, águas residuárias, drogas ilícitas, contaminantes de interesse emergente.

### WASTEWATER-BASED EPIDEMIOLOGY TO ESTIMATE DRUG USE: CONTRIBUTIONS OF ANALYTICAL CHEMISTRY TO SOCIETY

**ABSTRACT:** Residues of drugs and their metabolites are present in wastewater due to the lifestyle of modern societies. From the development of complete analytical methods to quantify these trace substances, it has been possible to empirically estimate the consumption of drugs of abuse by a population in real time, in a non-invasive and ethical way. This strategy, known wastewater-based epidemiology (WBE),

has been used in several countries to complement data from interviews, epidemiological surveys, censuses, hospitalizations, seizures, and medical prescriptions. It has also been possible to produce geo-localized and temporal data related to the use of different drugs, such as cocaine, marijuana, amphetamines, opioids and stimulants, in addition to alcohol, new synthetic drugs and controlled drugs. WBE has also been used to investigate the exposure of communities to chemical pollutants such as pesticides, cleaning and personal care products, and to infectious diseases such as COVID-19. This work aimed to disseminate the potential of WBE, as well as the contributions of analytical chemistry to generate information that can support structural actions in public safety, education, health and for the well-being of society.

**KEYWORDS:** Chemical analysis, wastewater, illicit drugs, contaminants of emerging concern.

## 1 | A EPIDEMIOLOGIA BASEADA NO ESGOTO

Por volta da virada do século, uma série de contaminantes ambientais passou a despertar um interesse cada vez maior das comunidades científica e regulatória. Estes contaminantes de interesse emergente não compreendiam apenas aquelas substâncias sintetizadas recentemente, mas também uma série de compostos associados ao estilo de vida das sociedades humanas e que vinham sendo detectados em diferentes compartimentos ambientais.

Resíduos de produtos farmacêuticos e de higiene pessoal, hormônios endógenos, além de uma série de substâncias associadas a bens de consumo, passaram a ser extensivamente investigadas, principalmente em amostras de águas naturais e residuárias, já que o esgoto se colocava como a principal fonte do aporte destes contaminantes para o ambiente.

Dentre os diversos livros e artigos científicos publicados nesta época, destacamos o livro "*Pharmaceuticals and Care Products in the Environment: Scientific and Regulatory Issues*" editado por pesquisadores da agência de proteção ambiental dos Estados Unidos (EPA). Nesta obra, o pesquisador da EPA Christian G. Daughton ponderou que resíduos de drogas ilícitas também poderiam ser encontrados no esgoto doméstico e propôs então uma nova ferramenta, não-intrusiva, para aumentar a consciência pública sobre o uso social de drogas ilícitas (DAUGHTON, 2001). Nascia assim, o que seria denominado, anos depois, epidemiologia baseada no esgoto (EBE).

Embora Daughton tenha lançado as bases para a EBE em 2001, foi apenas em 2005 que esta estratégia seria colocada em prática pela primeira vez pelo grupo do pesquisador Ettore Zuccato do Instituto Mario Negri de Pesquisas Farmacológicas. Foram observadas concentrações mensuráveis de cocaína e de seu principal metabólito pós-consumo, a benzoilecgonina, em amostras de águas superficiais do Rio Pó e de águas residuárias de quatro estações de tratamento de esgotos (ZUCCATO *et al.*, 2005). Com base nos resultados ambientais obtidos, os autores estimaram que o consumo de cocaína nas regiões investigadas excedia em muito os números oficiais nacionais.

Desde então, a EBE se consolidou como uma estratégia amparada por dados

empíricos, com capacidade única de monitorar tendências locais do abuso de diferentes tipos de drogas, em tempo real, preservando o anonimato dos indivíduos de uma população. Atualmente, dados de análises químicas de águas residuárias são incluídos em relatórios do Escritório das Nações Unidas sobre Drogas e Crime (UNODC) e do Observatório Europeu da Droga e da Toxicodependência (EMCCDA), uma agência da União Europeia responsável por acompanhar a evolução do fenômeno do abuso de drogas e subsidiar a avaliação de políticas nacionais e europeias.

Este trabalho se propõe a divulgar as potencialidades da EBE para investigar a exposição de populações a drogas de abuso, bem como explorar as características desta estratégia e os diversos desafios associados à produção dos dados de interesse.

## 2 | DROGAS E OUTRAS SUBSTÂNCIAS INVESTIGADAS VIA EBE

Para produzir estimativas de consumo via análise de esgotos, é necessário identificar potenciais biomarcadores associados, por exemplo, ao uso de drogas de abuso ou à exposição de indivíduos a contaminantes de interesse emergente. Um biomarcador adequado deve ser mensurável em águas residuais brutas, ter sido lançado no esgoto apenas como resultado da excreção humana, ter um perfil de excreção bem definido para evitar interferências de fontes exógenas ou endógenas, ser estável durante o transporte no sistema de esgotamento sanitário, durante a amostragem e no armazenamento das amostras.

A cocaína é a droga proscrita mais investigada pela EBE no mundo. Drogas cocaínicas apresentam-se na forma de base livre (onde o *crack* é o principal representante) e na forma de pó, o sal cloridrato de cocaína. Por ser bem absorvida pelas mucosas nasais, a forma de pó é comumente administrada via intranasal, enquanto que a forma de base livre é administrada via pulmonar, como o *crack* fumado, que se vaporiza ao ser aquecido. É importante mencionar que o consumo de cocaína por diferentes rotas de administração, ou mesmo junto a outras drogas, afetará a proporção dos metabólitos pós-consumo produzidos no organismo.

Ao ser consumida, a cocaína sofre hidrólise mediada por enzimas colinesterase e/ou carboxilesterase levando à formação de vários metabólitos, sendo a benzoilecgonina o mais abundante, estável em amostras de esgoto e, conseqüentemente, o biomarcador mais indicado para se estimar o consumo de cocaína. Não estranhamente, a benzoilecgonina é a substância mais investigada em estudos de EBE no mundo, até mesmo que a própria molécula da cocaína. Na ampla maioria dos estudos, o monitoramento da benzoilecgonina ao longo de diferentes dias da semana revela um padrão temporal característico do consumo de cocaína, onde há maior uso nos finais de semana e menor nos dias da semana. Estes resultados têm revelado que o perfil do usuário de cocaína é mais associado a atividades recreativas e sociais.

Se a cocaína for administrada via aquecimento, haverá formação considerável do éster da metilanidroecgonina que se metaboliza por clivagem enzimática e hidrólise espontânea para formar a anidroecgonina. Cabe mencionar que o monitoramento da concentração de anidroecgonina no esgoto, mesmo que de modo incipiente e relativo, pode contribuir para a identificação do consumo de cocaína na forma de base livre, como o *crack*. Porém, diferentemente das situações nas quais é possível estimar o consumo de cocaína monitorando-se a benzoilecgonina, ainda há poucos dados na literatura que suportem o uso da anidroecgonina para se estimar o uso de *crack*. Isto ocorre por dois motivos principais: primeiramente, a anidroecgonina tem sido pouco estudada ao redor do mundo, já que a perspectiva do consumo de cocaína base livre é mais prevalente em regiões próximas aos países produtores da cocaína, onde é possível obter a droga a custos baixos. Em segundo lugar, existe carência de informações associadas à anidroecgonina que permitam a realização de cálculos de estimativa de consumo, tais como a taxa de metabolização e a produção da substância precursora, o éster da metilanidroecgonina. Neste último caso, menciona-se ainda que a produção do precursor dependerá de aspectos pouco passíveis de controle, tais como a habilidade do usuário em manusear e fumar a droga.

Alternativamente, para acessar a contribuição do consumo de *crack* frente ao de cocaína é possível monitorar adulterantes, substâncias que buscam imitar ou adicionar novos efeitos à droga consumida. Neste sentido, o vermífugo levamisol tem sido o adulterante mais encontrado em amostras de cloridrato de cocaína, enquanto que o fármaco fenacetina é o mais prevalente no *crack*. O monitoramento destes adulterantes, concomitantemente a outras substâncias-alvo, é potencialmente promissor para ampliar o rol de informações da EBE no que diz respeito à forma de apresentação da cocaína efetivamente utilizada.

Quando a cocaína é consumida junto com bebidas alcoólicas, os níveis de benzoilecgonina diminuem e o metabólito cocaetileno passa a ser formado por transesterificação mediada por ação enzimática da carboxilesterase. Por este motivo, o cocaetileno tem sido um importante biomarcador para identificar o consumo concomitante de cocaína e bebidas alcoólicas, uma vez que sua prevalência no esgoto tende a ser maior em amostras coletadas durante fins de semana e em regiões mais urbanizadas.

Após ingestão, o etanol é majoritariamente oxidado no fígado por enzimas álcool-desidrogenase e aldeído-desidrogenase. No entanto, o etilglicuronídeo e o etilsulfato, formados por degradação não-oxidativa, são os metabólitos diretos do consumo de álcool, e os alvos preferidos na EBE, mesmo considerando uma excreção limitada a menos de 0,1%. Por ser bastante estável no esgoto, o etilsulfato é o biomarcador comumente usado em inúmeros estudos para estimar o consumo de álcool por EBE.

Várias outras drogas de abuso, além da cocaína, têm sido investigadas via EBE. Dentre os mais de 60 tipos de canabinoides, o delta-9-tetra-hidrocanabinol (THC) é o principal componente ativo desse grupo, mas não o biomarcador a ser identificado no esgoto. Isso porque após metabolizado, o THC é majoritariamente excretado na urina como

11-nor-9-carboxi-THC, a substância comumente empregada para estimar o consumo de maconha em estudos de EBE. Ao contrário da cocaína, a ampla maioria das investigações temporais do consumo de maconha revelam um consumo que não varia significativamente em durante os dias da semana, sugerindo a existência de um perfil de usuário que consome a droga de modo mais constante que a cocaína, independentemente de eventos sociais. Cabe mencionar, entretanto que há também relatos na literatura que mostram consumos mais elevados em festas e feriados como o Carnaval.

Estimativas do consumo de heroína buscam investigar a ocorrência da 6-acetil morfina no esgoto. Embora não seja o principal metabólito, a 6-acetil morfina é preferida em detrimento à morfina, que além de um metabólito da heroína é também um fármaco comumente consumido em ambientes hospitalares, o que pode gerar resultados inexatos considerando a existência de outra fonte de aporte desta substância. De modo análogo, a 6-acetilcodeína é o biomarcador usado para estimar o consumo de codeína, enquanto que a presença do 2-etilideno-1,5-dimetil-3,3-difenilpirrolidina (EDDP) tem sido usada para estimar o consumo de metadona.

Estimulantes anfetamínicos, como a própria anfetamina, a metanfetamina e a 3,4-metilenodioximetanfetamina (MDMA) também têm sido investigadas via EBE. Neste caso, ao contrário da cocaína, do THC e dos opioides, as substâncias-alvo correspondem às drogas inalteradas, ou seja, tais como foram consumidas. Cabe mencionar que o MDMA é a substância comumente associada ao uso de ecstasy. Para as anfetaminas, também são observados padrões de consumo dependentes de atividades recreativas e sociais, já que é comum níveis mais elevados destas substâncias em amostras de esgoto coletadas durante fins de semana em comparação aos dias da semana.

O consumo de novas substâncias psicoativas (NSP) também vem sendo estimado via epidemiologia do esgoto. Neste sentido, o consumo de catinonas sintéticas tem sido investigado em diferentes países da Europa por meio da determinação de diferentes biomarcadores. Outras NPS como metoxetamina, metilona, etilona, butilona, metiltienilpropamina, 4-metoximetanfetamina, 4-metoxianfetamina, metedrona, mefedrona, nafirona, também têm sido relatadas.

Drogas prescritas, porém, controladas, como antibióticos, antidepressivos e ansiolíticos, também têm sido objetos de estudos envolvendo a análise de águas residuárias. Cabe mencionar que para substâncias que não são propositalmente consumidas e/ou excretadas no esgoto, como os pesticidas, a seleção de biomarcadores depende do rastreamento quanto a existência de outras fontes de aporte nas águas residuais, possíveis processos metabólicos em plantas, animais e alimentos, bem como sua presença em atividades desenvolvidas na área urbana.

### 3 I ESTIMANDO O CONSUMO DE DROGAS

Uma vez no esgoto, resíduos de uma droga de abuso, bem como de seus produtos de metabolização, podem ser quantificados, com precisão e exatidão aceitáveis, por meio do estabelecimento de uma sequência analítica completa. Porém, calcular a concentração da substância-alvo em uma matriz tão complexa quanto o esgoto é apenas uma das etapas envolvidas na produção de uma estimativa acerca do consumo de uma droga de abuso.

Na realidade, a estimativa do consumo baseia-se na realização de um retrocálculo que leva em consideração, não somente a concentração da droga ou do metabólito no esgoto bruto, mas também uma série de outras informações igualmente importantes. A Equação 1 mostra que a estimativa de consumo ( $C$ , em mg/dia/1000hab) é obtida com base na concentração de uma substância-alvo no esgoto ( $c$ , em mg/L), na vazão volumétrica do esgoto que aflui no local de amostragem ( $Q_v$ , em L/dia), em um fator de correção ( $f$ ) relativo à proporção molar da droga metabolizada e excretada após o consumo e no número de habitantes ( $hab$ ) diretamente relacionados ao local de amostragem.

$$C = \frac{c \times Q_v \times f}{hab} \quad (1)$$

Mesmo oferecendo respostas em tempo real, existem importantes incertezas envolvidas nos retrocálculos. Além dos erros aleatórios inerentes a qualquer tipo de análise química, outras fontes de incerteza, tais como flutuações na população, o tempo de residência de uma substância no sistema de esgotamento sanitário, a estabilidade dos analitos, atividades relacionadas com a produção e excreção de drogas e metabólitos, dentre outros, ainda constituem importantes desafios ao estabelecimento de resultados mais precisos via EBE. A seguir, serão pontuadas algumas destas fontes de incerteza, bem como as principais estratégias que vem sendo utilizadas para trazer maior confiabilidade aos resultados obtidos.

#### 3.1 Análise química do esgoto

A sequência analítica deve incluir etapas de amostragem, preservação das amostras, preparo das amostras, isolamento e extração dos biomarcadores de interesse e, finalmente, identificação e/ou quantificação dos alvos, notadamente por técnicas de separação analítica acopladas à sistemas robustos de detecção. Todas estas etapas devem ser realizadas buscando-se minimizar as fontes de incerteza de modo que um resultado adequado seja produzido.

##### 3.1.1 Amostragem

A carga e a variabilidade de substâncias químicas que aportam no esgoto doméstico estão diretamente associadas aos hábitos dos indivíduos que compõe uma determinada população em estudo. Neste sentido, a amostragem de uma alíquota pontual ou discreta

de uma amostra de esgoto dificilmente será representativa. Neste sentido, amostras compostas, com alíquotas colhidas ao longo de um período determinado de tempo, são preferíveis para compor estimativas de consumo.

A coleta de amostras na entrada de estações de tratamento de esgotos (ETE) tem sido a principal estratégia amostral em estudos de EBE, embora a coleta em elevatórias, bem como na saída de escolas, estádios, penitenciárias, etc., também seja explorada. Independente do ponto amostral, a obtenção de uma amostra representativa é o aspecto chave no sucesso da análise química como um todo. Ou seja, de nada adianta ter acesso aos melhores instrumentos analíticos para quantificação de biomarcadores se a amostra, objeto do estudo, não representa a população investigada. Neste sentido, grande parte dos trabalhos lança mão de uma amostragem composta e acumulada, com alíquotas sendo colhidas ao longo de um período de 24 h. Embora as alíquotas possam ser colhidas em intervalos de tempo pré-definidos, as estratégias mais robustas envolvem a coleta em função da vazão do esgoto que aflui no ponto amostral. Desta maneira, amostras coletadas em função da vazão tendem a ser mais representativas, considerando que, durante o período de 24 h, há variações notáveis na vazão do esgoto, influenciada tanto pelos hábitos da população quanto pelas atividades inerentes aos serviços de esgotamento sanitário.

A coleta de amostras durante um período tão longo de tempo, implica na necessidade de preservar a integridade dos analitos, haja vista que são substâncias orgânicas potencialmente susceptíveis a diversas fontes de transformação ou degradação. Neste sentido, é comum o armazenamento das alíquotas, ou da amostra composta consolidada, sob baixa temperatura durante o período amostral. Para isso, são usados amostradores automatizados refrigerados que podem ser ajustados para trabalhar com a coleta de alíquotas em função do tempo ou da vazão.

Outro aspecto importante relacionado à amostragem, ao menos na realidade brasileira, é a necessidade de estabelecer parcerias com concessionárias de água e esgoto garantindo acesso às amostras de modo contínuo. Neste sentido, cabe mencionar que muitas companhias de saneamento já contam com amostradores automatizados, o que pode ser um aspecto interessante para o estabelecimento de acordos e parcerias.

Após a amostragem, os frascos devem ser selados, tampados, identificados, acondicionados em caixas térmicas e transportados, sob refrigeração, para o local onde serão executadas as demais etapas da sequência analítica. Todos os frascos empregados durante a amostragem devem ser previamente descontaminados seguindo-se protocolos de limpeza. Em local apropriado, as amostras podem ser imediatamente submetidas às etapas subsequentes de preparo ou congeladas para preparo posterior. Neste último caso, é opcional, porém altamente desejável, que as amostras sejam previamente filtradas e, se possível, enriquecidas com algum padrão de controle analítico.

### 3.1.2 Preparo da amostra e extração dos analitos

Esta etapa envolve um conjunto de procedimentos voltados ao isolamento dos biomarcadores da matriz do esgoto. Tais procedimentos devem ser realizados a partir de métodos previamente desenvolvidos e validados. Ao chegarem ao local apropriado, as amostras são submetidas a etapas de filtração, em membranas de fibra de vidro e/ou à base de celulose, a depender do método validado

Os analitos são geralmente isolados da amostra empregando-se extração em fase sólida (*SPE*, do inglês *solid-phase extraction*), uma técnica simples e relativamente rápida quando comparada às demais disponíveis. Os mecanismos de separação envolvidos na *SPE* são baseados em processos físicos e/ou químicos, sendo que a escolha da fase sólida dependerá da natureza química das substâncias de interesse e, igualmente, da complexidade da matriz. Uma das fases sólidas adsorventes mais usadas em métodos multiresíduos possui copolímeros com grupos funcionais hidrofílicos e lipofílicos, além de adsorventes mistos baseados em fase reversa e troca iônica.

Após a extração, os analitos retidos na fase sólida são eluídos com misturas de solventes orgânicos apropriados, tais como metanol, acetonitrila, acetona e acetato de etila. Os extratos resultantes são então submetidos à evaporação para redução de volume, com o consequente aumento da concentração dos analitos ao final de todo o preparo da amostra.

Falhas no desenvolvimento da etapa de extração podem levar a baixas recuperações analíticas, afetando principalmente a detectabilidade do método e a exatidão dos resultados. Por outro lado, a precisão dos resultados pode ser comprometida por métodos pouco robustos, onde pequenas alterações no procedimento, mesmo que ocorrendo de modo involuntário, geram resultados pouco confiáveis. Convém reforçar a importância de se validar previamente os métodos, de modo que as principais fontes de incerteza sejam previamente conhecidas e, conseqüentemente, controladas.

Outra importante fonte de erros está associada à complexidade da matriz de esgoto, que contém, além dos biomarcadores de interesse, uma infinidade de compostos com potencial de interferir nas análises. Cabe mencionar aqui que, usualmente, as substâncias-alvo na EBE apresentam-se nas amostras sob concentrações-traço, ou seja, entre nanograma e micrograma por litro. Além disso, a carga orgânica no esgoto, medida em termos de demanda química de oxigênio (DQO), encontra-se na faixa de miligrama a grama de O<sub>2</sub> por litro.

Para prevenir efeitos de matriz, as amostras filtradas podem ser enriquecidas com um padrão analítico, preferencialmente uma substância que esteja virtualmente ausente na amostra, que possua características análogas às das substâncias-alvo, de modo que seu sinal analítico possa ser usado para corrigir flutuações que comprometam a exatidão do resultado. Considerando que grande parte dos instrumentos analíticos empregados para a

quantificação dos biomarcadores baseiam-se em sistemas de espectrometria de massas, padrões deuterados dos biomarcadores são frequentemente usados como padrões analíticos. Estas substâncias deuteradas, denominadas *surrogates*, participarão de todas as etapas do preparo e da análise das amostras, sendo, portanto, submetidas às mesmas fontes de erros pelas quais os biomarcadores também serão expostos, tornando possível dimensioná-los.

### 3.1.3 Quantificação dos biomarcadores

Devido às baixas concentrações de grande parte dos biomarcadores, as análises químicas devem ser realizadas de modo a evitar contaminações cruzadas. Além disso, são exigidas técnicas instrumentais de elevada detectabilidade, sensibilidade e robustez, sendo capazes de separar, identificar e quantificar as substâncias de interesse mesmo na presença de outras substâncias potencialmente interferentes.

A técnica mais usada para investigação de drogas de abuso é a cromatografia líquida (*LC*, do inglês *liquid chromatography*) acoplada a espectrometria de massas (*MS*, do inglês *mass spectrometry*). Embora existam diversas configurações para equipamentos do tipo LC-MS, a ampla maioria dos estudos envolvendo EBE baseia-se no uso de cromatógrafos de ultra a alta performance acoplados a sistemas de espectrometria de massas sequenciais (ou *in tandem*), ou seja, *MS/MS*.

Como grande parte dos biomarcadores é previamente conhecida, sistemas *MS/MS* do tipo triploquadrupolo (QqQ) são preferíveis em análises de alvos predeterminados (*target analysis*), apresentando rapidez, especificidade e excelente detectabilidade quando comparado a outros sistemas de espectrometria de massas. A análise de um alvo por LC-MS/MS[QqQ], baseia-se na aquisição de respostas instrumentais no modo *SRM* (do inglês, *Selected Reaction Monitoring*), onde uma substância é monitorada a partir de uma ou mais transições (ou reações) características do sistema íon-precursor/íon-produto. Neste caso, íons moleculares formados na interface entre os sistemas *LC* e *MS* são selecionados no primeiro quadrupolo (Q) e submetidos a uma fragmentação controlada no segundo quadrupolo (q), uma célula de colisão. Os fragmentos então produzidos são também selecionados no terceiro quadrupolo (Q). Embora seja uma técnica de baixa resolução de massas, a especificidade das reações precursor/produto garantem uma excelente seletividade, traduzida em respostas com elevada relação sinal/ruído e detectabilidade.

A interface entre os sistemas de cromatografia líquida e espectrometria de massas se dá por diferentes fontes de nebulização/ionização, de modo que efeitos de supressão do sinal possam ser adequadamente investigados e eliminados. Atualmente, sistemas de espectrometria de massas são frequentemente equipados com fontes de ionização por *electrospray* (*ESI*, do inglês *electrospray ionization*) e, em alguns casos, com fontes adicionais de ionização química à pressão atmosférica. Cabe mencionar, que uma

importante fonte de incerteza tem relação direta com os mecanismos operantes nas fontes ESI, notadamente para amostras que apresentam matriz complexa.

Neste caso, o efeito da matriz é definido como uma alteração do sinal analítico causada por algum componente da amostra que não seja o próprio analito. De modo empírico, este efeito pode ser observado quando o sinal do analito em uma amostra de campo é diferente do detectado em uma solução do mesmo analito em meio solvente, seja via supressão ou aprimoramento do sinal. Para extratos de esgoto, efeitos de supressão são mais comuns e podem ocorrer, por exemplo, quando componentes da matriz competem com os analitos para obtenção de carga na fonte de ESI, seja interferindo na capacidade do analito permanecer carregado na fase gasosa, aumentando a tensão superficial das gotículas do spray, ou aumentando a resistência elétrica. Embora os mecanismos exatos ainda não sejam conhecidos, sabe-se que a coeluição de analitos com interferentes da matriz levam a problemas na precisão, exatidão e detectabilidade do método. Neste caso, possíveis soluções envolvem a otimização das etapas de separação analítica, extração e limpeza dos extratos, como pela diminuição do volume de injeção, o uso de extratos diluídos, a alteração de parâmetros operacionais da interface e, notadamente, ao uso de padrões deuterados como *surrogates* e/ou padrões internos.

Outras soluções possíveis envolvem o uso de curvas analíticas construídas diretamente em matriz. Neste caso, as abordagens podem envolver matrizes sintéticas, matrizes parecidas com às analisadas (tais como água de torneira, de rios ou lagos), matrizes similares às analisadas, mas com baixa concentração da substância alvo, além da construção de curvas de adição de padrão.

Finalmente, cabe mencionar que outras configurações instrumentais também têm sido empregadas, sendo que as mais comuns envolvem o uso de sistemas de espectrometria de massas híbridos, onde espectrômetros de alta resolução, como os baseados em armadilhas de íons (*IT*, do inglês *ion trap*) ou tempo de voo (*TOF* do inglês *time-of-flight*), são usados no lugar do terceiro quadrupolo na análise sequencial de massas. Neste caso, a seletividade do método passa a depender da capacidade do sistema em medir a massa exata dos íons moleculares. Equipamentos do tipo quadrupolo-tempo-de-voo (QTOF) combinam uma boa detectabilidade em alta resolução com uma precisão estável da massa, sendo especialmente adequados em análises exploratórias voltadas à identificação de substâncias desconhecidas em uma amostra, *non-target analysis*. Esses analisadores têm sido usados para complementar diversas investigações para identificação de novas drogas sintéticas, novos adulterantes, produtos de degradação e metabolização de interesse da EBE.

### 3.1.4 Combinando preparo e análise de amostras

Várias estratégias têm sido sugeridas na literatura para diminuir erros e incertezas

que surgem nas etapas de preparo e a análise de amostras. Uma das mais bem-sucedidas consiste na execução da etapa de extração em linha com a análise em *LC-MS/MS*. A *SPE* online implica na redução de cerca de 100 vezes no volume da amostra bruta necessária, promovendo maior frequência analítica, maior facilidade para manipulação, estocagem e pré-preparo de amostras. Além disso, outros benefícios também têm sido atribuídos ao uso de *SPE online* em detrimento ao preparo *off-line*. Destacam-se a diminuição do efeito de matriz, com menor supressão do sinal analítico na fonte ESI, maior reprodutibilidade em termos de precisão, possibilidade de analisar com facilidade réplicas autênticas de uma amostra e maior detectabilidade, já que todo o eluato da *SPE* será injetado no sistema cromatográfico.

As primeiras estratégias envolvidas na incorporação da etapa de extração de modo online, envolviam a adaptação de sistemas de extração *off-line* em sistemas de análise em fluxo, por meio do uso de sistemas diversos de propulsão de amostras e reagentes, com bombas peristálticas, bombas solenoides e bombas pistão. Nestes casos, cartuchos *SPE* comercialmente disponíveis para extrações *off-line* eram adaptados. Com a introdução de colunas *SPE* online reutilizáveis, começaram a surgir cada vez mais trabalhos explorando esta possibilidade. Porém, o uso de colunas *SPE* reutilizáveis, requer cuidados adicionais durante a implementação e validação de métodos, de modo que não exista contaminação cruzada entre as amostras. Isso ocorre quando há transferência de traços do analito de uma amostra para outra. Conhecido como *carryover*, este fenômeno ocorre quando parte dos analitos de interesse não eluem da fase sólida adsorvente quando esperado, sendo então transferido na etapa de eluição da próxima amostra, causando um erro sistemático na análise.

Outra característica da *SPE* online, quando comparado com ao modo *off-line*, é a necessidade de um equipamento dedicado a manipular cartuchos descartáveis ou a colunas reutilizáveis, gerando assim um custo inicial elevado para a implementação. Entretanto, convém mencionar que as vantagens analíticas compensam esse investimento, visto que a automatização do processo oferece também maior liberdade para que o analista desenvolva outras atividades enquanto o equipamento executa o método de extração e a análise das amostras de modo automatizado, com pouca interveniência do analista e de modo contínuo, permitindo que várias amostras brutas possam ser submetidas à extração e análise em um curto período. Este aspecto também é fundamental, haja vista que os biomarcadores de interesse podem sofrer transformações indesejáveis quanto maior for o tempo entre a amostragem e a análise propriamente dita.

### 3.2 Fator de correção $f$

Uma das principais discussões acerca da confiabilidade das informações produzidas via EBE se baseia no fator de correção  $f$ , ou seja, no número que será usado para estabelecer, nos retrocálculos, a proporção da droga metabolizada e excretada pós-

consumo.

No primeiro trabalho a colocar em prática a EBE, a estimativa da quantidade de cocaína consumida foi acessada pelo fator  $f$  relativo à proporção molar da cocaína metabolizada à bezoilecgonina. Com base em dados farmacocinéticos disponíveis à época, foi assumido que 45% da cocaína administrada unicamente via intranasal era excretada na urina na forma de bezoilecgonina (ZUCCATO *et al.*, 2005). Assim, ao dividir a razão das massas molares de cocaína e bezoilecgonina (303/289) por 0,45, um valor de  $f$  de 2,33 foi obtido. Este valor tem sido empregado até hoje em muitos trabalhos publicados sobre o tema.

Em 2013, foi sugerido que o valor de  $f$  de 3,59 passasse a ser utilizado, uma vez que considerava tanto uma maior quantidade de dados farmacocinéticos acessíveis para ingestão da cocaína, quanto a disponibilidade de informações relativas à diferentes rotas de administração da cocaína, seja intranasal, intravenosa, oral ou pulmonar (CASTIGLIONI *et al.*, 2013) chemical analysis, stability of drug biomarkers in sewage, back-calculation of drug use (specific case of cocaine. Os autores consideraram ainda informações sobre a prevalência das formas de uso da droga na Europa, onde a via intranasal representa cerca de 95% da cocaína consumida

Em 2014, com base nas mesmas considerações levantadas no ano anterior, foi sugerido um valor diferenciado de  $f$  para estimar o uso de cocaína na ilha caribenha de Martinica, onde os autores reportaram prevalência de 75% no consumo de cocaína fumada como *crack* em detrimento do cloridrato de cocaína, utilizado principalmente via intranasal (DEVAULT *et al.*, 2014). Neste caso, foi sugerido um fator de correção  $f$  de 5,67, exclusivo aos estudos realizados naquela ilha.

Mais recentemente, em trabalho realizado no Distrito Federal do Brasil, foi proposto um valor de  $f$  de 4,19 levando-se em consideração tanto os dados farmacocinéticos para diferentes rotas de administração da cocaína, quando os dados levantados pelo Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia para Políticas Públicas do Álcool e Outras Drogas que sugerem prevalência de 70% do consumo de cocaína via intranasal no Brasil, sendo o restante atribuído ao *crack* (SODRÉ, F.F. *et al.*, 2018)

A Tabela 1 mostra fatores de correção  $f$  originados a partir de informações referentes à proporção da metabolização/excreção de diferentes drogas de abuso.

Droga	Substância Alvo	Taxa de excreção (%)	Razão molar droga/ biomarcador	<i>f</i>
Cocaína	Benzoilecgonina	45 <sup>a</sup>	1,05	2,33
	Benzoilecgonina	29,2 <sup>b</sup>	1,05	3,59
	Benzoilecgonina	18,5 <sup>c</sup>	1,05	5,67
	Benzoilecgonina	25 <sup>d</sup>	1,05	4,19
Maconha	Carbioxo-THC	0,6	0,91	152
Anfetamina	Anfetamina	30	1,0	3,33
Metanfetamina	Metanfetamina	43	1,0	2,33
<i>Ectasy</i>	MDMA	65	1,0	1,54
	MDMA	20	1,0	5,0
Heroína	Morfina <sup>e</sup>	42	1,29	3,08
	6-acetilmorfina	1,3 <sup>c</sup>	1,13	86,92

<sup>a</sup>Uso intranasal, <sup>b</sup>diferentes formas de uso na Europa, <sup>c</sup>diferentes formas de uso no Caribe, <sup>d</sup>diferentes formas de uso no Brasil, <sup>e</sup>metabólito majoritário, mas não exclusivo da heroína.

Tabela 1. Droga ilícitas e de abuso, substâncias-alvo, taxa de excreção e fatores de correção empregados em estudos de epidemiologia do esgoto.

É importante mencionar que outros aspectos podem influenciar o valor de *f*, tais como o coconsumo de cocaína com o álcool, que também promove a formação do cocaetileno. Entretanto, nenhuma abordagem concreta foi proposta na literatura já que a excreção de cocaetileno depende das quantidades relativas consumidas de álcool e cocaína. Por este motivo, são comuns investigações sobre o poliuso de drogas por meio de razões entre diferentes biomarcadores, como, por exemplo, cocaetileno/benzoilecgonina.

### 3.3 Estabilidade das substâncias-alvo

Por serem de origem orgânica, os biomarcadores podem sofrer transformações em qualquer momento da sequência analítica. Porém, há duas situações principais nas quais é necessário conhecer mais profundamente a estabilidade destas substâncias: (i) durante o período em que permanecem no sistema de esgotamento sanitário (*in sewer*) e após a coleta das amostras (*in sample*) (MCCALL *et al.*, 2016).

Após serem excretados no sistema de esgotamento sanitário, fatores físicos, químicos e biológicos podem levar a transformações de biomarcadores antes que seja possível analisá-los nas amostras de esgoto. Este tipo de incerteza tem sido cada vez mais abordada em estudos de EBE, já que desconsiderá-la nos retrocálculos pode implicar em valores sub ou superestimados.

Fatores físicos estão relacionados, principalmente, à partição dos biomarcadores entre diferentes fases e/ou compartimentos via mecanismos de sorção, sedimentação, retenção por micro-organismos, e/ou trocas com a atmosfera. Os fatores químicos mais importantes são o pH e o potencial redox, enquanto os biológicos se resumem na ação de micro-organismos, como as bactérias sulfato-redutoras e as arqueias metanogênicas que

se encontram tanto suspensas no esgoto quanto na forma de biofilmes nas galerias da rede de esgotamento. Em todos os casos, a temperatura exerce um papel importante nos mecanismos de transformação.

Além das características do meio, propriedades inerentes aos biomarcadores, como a constante de dissociação ácida ( $K_a$ ), a pressão de vapor e o coeficiente de partição octanol/água ( $K_{ow}$ ), também devem ser considerados.

Tanto nas transformações *in sewer*, quanto nas *in sample*, os mecanismos podem ser bióticos e/ou abióticos, sendo que ambos levam à alteração ou degradação de biomarcadores. Os mecanismos mais comuns são a conjugação/desconjugação com alguma substância endógena, como o ácido glucurônico (glucuronidação e desglucuronidação), além de processos de oxidação, redução e hidrólise. Um exemplo notável é a hidrólise espontânea que ocorre em alquil ésteres sob pH menor que 4, influenciando, por exemplo, a estabilidade de biomarcadores cocaínicos.

A estabilidade *in sample* de biomarcadores tem sido investigada desde os primórdios da EBE, onde a integridade destas substâncias é estudada mediante variações do meio e do sistema, como pH, temperatura, adição de conservantes (como azida e metabissulfito de sódio), filtração, tipo de armazenamento (como em cartuchos SPE) e tempo de estocagem. Até o momento, observa-se que a estabilidade varia para cada biomarcador. Alguns tratamentos podem diminuir as condições de transformação, como a préfiltração em membranas de baixa porosidade (0,22 a 0,1  $\mu\text{m}$ ), visando eliminar a carga de micro-organismos das amostras, a diminuição do pH para cerca de 2, muito eficiente para cocaínicos, mas não para o carboxi-THC, e o congelamento de amostras ou de cartuchos de extração SPE por até seis semanas (MCCALL *et al.*, 2016). Esta última estratégia é notadamente usada quando instrumentos analíticos se encontram em manutenção ou pela necessidade de despachar amostras para análise em outros laboratórios locais ou mesmo a outros países.

Ao contrário dos estudos envolvendo a estabilidade *in sample*, processos de transformação *in sewer* foram inicialmente ignorados devido à complexidade em se mimetizar, em laboratório, as condições observadas nos sistemas de esgotamento e ao fato dos biomarcadores permanecem por um curto tempo no esgoto. No entanto, esta é uma importante lacuna que tem sido cada vez mais investigada visando o aprimoramento da EBE. As estratégias empregadas em estudos de estabilidade *in sewer* baseiam-se no em reatores com biofilmes livres em suspensão, reatores com biofilme fixo sob condições aeróbica e anaeróbica, sistemas em escala piloto e/ou sistemas reais (CHOI *et al.*, 2020). Embora estudos com reatores sejam mais facilmente controlados, há desafios importantes para se reproduzir parâmetros hidráulicos de sistemas reais, como o tempo de detenção hidráulica, a razão área de biofilme / volume de esgoto, a vazão e tensão de cisalhamento, assim como parâmetros como oxigênio dissolvido, pH, DQO, dentre outros. Sistemas em escala piloto oferecem condições mais próximas do real, porém são menos acessíveis.

De um modo geral, a estabilidade de biomarcadores, tanto no esgoto quanto nas amostras, é considerada baixa para taxas de transformação entre 60 e 100%, intermediária (transformação de 21 a 59%) e alta (transformação de até 20%). Ainda, considera-se uma estabilidade variável quando a transformações continuam após 24h. Dentre os biomarcadores mais investigados na EBE, a cocaína apresenta baixa estabilidade *in sewer* e *in sample*, enquanto a benzoilecgonina é altamente estável na amostra, mas possui estabilidade intermediária *in sewer*. A anfetamina possui estabilidade variável *in sewer* e *in sample*, enquanto a metanfetamina é estável em ambos os casos. Os canabinoides THC e carboxi-THC apresentam estabilidade variável tanto no esgoto, quanto nas amostras, sofrendo também perdas por sorção no material particulado em suspensão.

Os dados de estabilidade de biomarcadores têm subsidiado iniciativas voltadas à correção dos cálculos. Sugere-se que correções são desnecessárias para biomarcadores estáveis, enquanto que para os de estabilidade variável, baixa e intermediária, estudos devem ser realizados para conhecer e corrigir esta fonte de erros (MCCALL *et al.*, 2016). Estima-se, por enquanto, que um fator de correção universal não seja capaz de ajustar, com exatidão, a influência da transformação de biomarcadores, haja vista a singularidade de cada sistema de esgotamento e a dependência de fatores espaço-temporais. Com isso, modelos capazes de simular transformações *in sewer* têm sido desenvolvidos considerando as características singulares de cada sistema de esgoto, bem como as taxas de transformação já disponíveis. Outra alternativa é corrigir os resultados em função de parâmetros comumente medidos em amostras de esgoto (como, DBO, DQO, etc.) ou usar outros biomarcadores de referência, como acessulfame e paracetamol (O'BRIEN *et al.*, 2014).

### 3.4 Flutuação do número de indivíduos no ponto amostral

Uma importante característica da EBE é permitir uma avaliação do consumo *per capita*. Para isso, é necessário o uso de dados confiáveis do número de indivíduos da região em estudo para reduzir incertezas. De um modo geral, os dados populacionais utilizados por essa estratégia consideram o censo demográfico da região atendida pela ETE e/ou extrapolações obtidas a partir da sua capacidade de atendimento, do número de residências conectadas à rede coletora ou da sua vazão média no período. No entanto, esses dados são atualizados em períodos relativamente longos e não refletem a dinâmica da mudança do número de indivíduos da região devido aspectos como migração pendular diária entre cidades dormitório e locais de trabalho/estudo, realização de festas e eventos musicais, esportivos, etc., períodos de férias e feriados, dentre outros.

Para consolidar as estimativas populacionais na EBE, algumas estratégias têm sido adotadas, como realização de amostragens junto ao censo demográfico e a normalização da população em função de parâmetros físico-químicos do esgoto, como DQO, fósforo total e nitrogênio amoniacal, ou de biomarcadores antrópicos como cafeína, nicotina,

assesulfame, atenolol, carbamazepina, gabapentina e ácido 5-hidroxiindolacético (O'BRIEN *et al.*, 2014). É importante ressaltar um marcador do tamanho populacional deve atender alguns critérios, dentre eles ser facilmente mensurável nas amostras, ter sua carga no esgoto diretamente relacionada ao tamanho da população e ser estável durante o período de residência no sistema de esgotamento. O uso de dados de telefonia móvel também tem sido usado, sendo capaz de indicar a variabilidade diária de indivíduos na região em estudo, e permitindo, em tese, indicar a população contribuinte no momento exato da coleta, no caso de amostragens de alíquotas discretas.

#### 4 | APLICAÇÃO DA EBE NO BRASIL

Estimativas do uso de drogas têm sido produzidas no Distrito Federal desde 2010 graças às iniciativas de pesquisadores da Universidade de Brasília e da Polícia Federal, com apoio da CAESB (Companhia de Saneamento Ambiental do Distrito Federal), do INCTAA (Instituto Nacional de Ciências e Tecnologias Analíticas Avançadas) e de agências de fomento à pesquisa como o CNPq, FAPDF e os Ministérios da Cidadania e da Justiça e Segurança Pública.

Além de oferecer informações numéricas quanto ao consumo *per capita* de uma droga, a EBE permite também uma avaliação geolocalizada, ou seja, a construção de um mapa de consumo. Isto é possível em situações em que amostras são coletadas na entrada de diferentes ETE, sendo cada uma responsável por receber e tratar a água residuária de uma determinada região. Na Figura 1, são mostradas estimativas para a carga consumida de cocaína, em gramas por dia (A) e para o consumo *per capita* (B) em diferentes regiões atendidas por oito ETE do Distrito Federal.

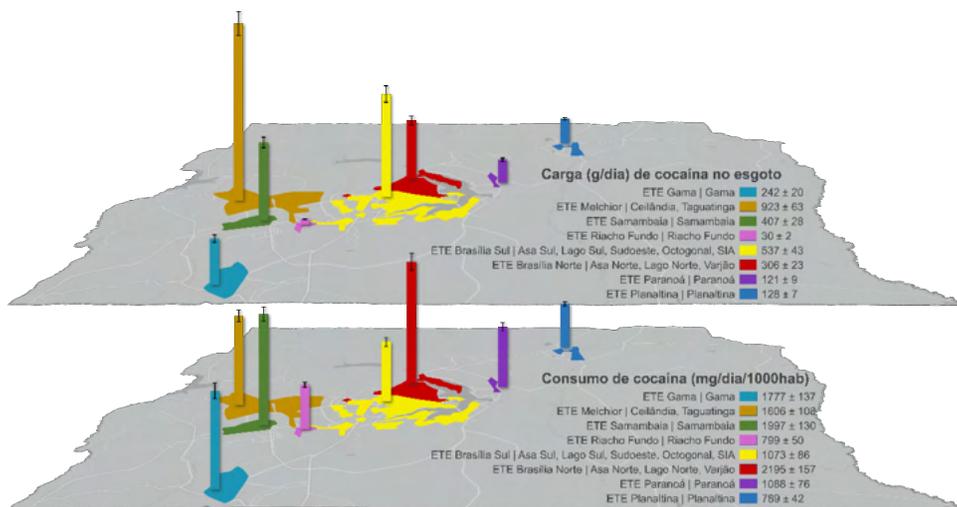


Figura 1. Mapa da carga consumida (A) e do consumo *per capita* (B) de cocaína estimada no Distrito Federal via epidemiologia do esgoto. Adaptado de (SODRÉ, F.F. *et al.*, 2018)

Observa-se que maiores quantidades de cocaína (em g/dia) são consumidas na parte oeste do Distrito Federal, ou seja, nas regiões administrativas de Taguatinga, Ceilândia e Samambaia. Porém, quando os dados são normalizados pelo número de indivíduos atendidos por cada ETE, observa-se um consumo *per capita* mais elevado na região norte de Brasília, atendida pela ETE Brasília Norte. Dados coletados ao longo dos anos, confirmam que o consumo *per capita* se mantém elevado na região norte de Brasília em comparação às outras áreas investigadas.

Por envolver determinações em tempo real, também é possível estimar o consumo em diferentes dias da semana. A Figura 2 mostra o perfil de consumo semanal dos habitantes atendidos pela ETE Brasília Norte.

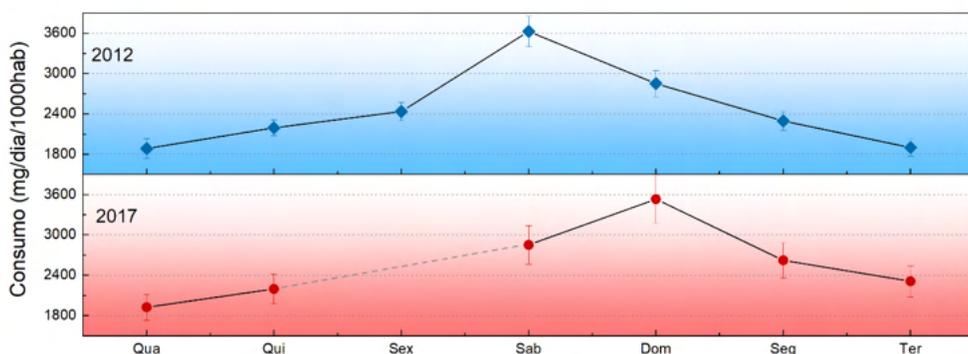


Figura 2. Perfil de consumo de cocaína na região atendida pela ETE Brasília Norte estimado via análise de esgotos. Adaptado de (DA SILVA *et al.*, 2018; SODRÉ, F.F. *et al.*, 2018)

Na Figura 2 observa-se aumento do consumo de cocaína no final de semana em comparação aos outros dias da semana, o que pode indicar um incremento pelo uso recreativo da cocaína, ou seja, usuários esporádicos que consomem drogas apenas em eventos sociais ou festivos, ou ainda usuários que aumentem o uso durante os dias livres, nos finais de semana. Nota-se, portanto, que além de oferecer um panorama quanto ao consumo de drogas, a EBE pode também trazer luz a questões igualmente importantes relacionadas ao comportamento e perfil dos usuários.

Outro aspecto importante da EBE é permitir a construção de dados históricos quanto ao consumo de drogas. A Figura 3 mostra a evolução dos dados de consumo de cocaína no Distrito Federal, estimados por EBE.

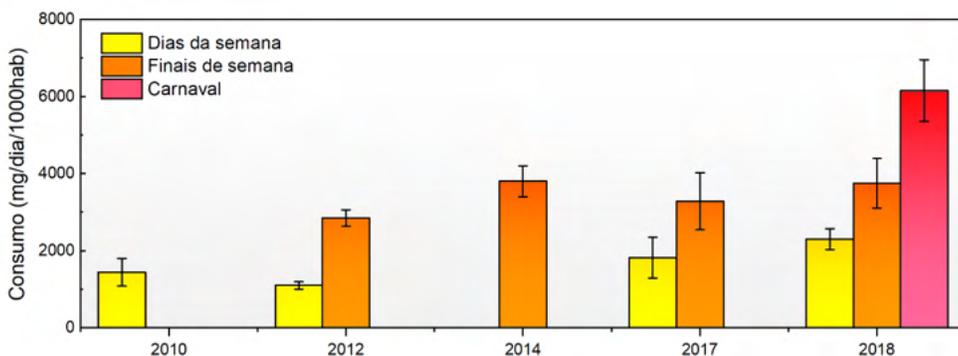


Figura 3. Evolução do consumo *per capita* de cocaína no Distrito Federal estimado via análise de esgotos. Adaptado de (DA SILVA *et al.*, 2018; MALDANER *et al.*, 2012; SODRÉ, F.F. *et al.*, 2018; SODRÉ, Fernando Fabriz *et al.*, 2017)

O perfil do consumo de cocaína, caracterizado por ser mais elevado em finais de semana, também é ilustrado na Figura 3, onde são mostrados alguns resultados colhidos ao longo de quase uma década. Também é possível observar que o consumo de cocaína no Distrito Federal parece se manter constante ao longo dos anos, com exceção de aumentos notórios observados no Carnaval de 2018, um reflexo do perfil recreativo e social do usuário de cocaína.

Além da benzoilecgonina, a quantificação de outros biomarcadores no esgoto, podem ser úteis para um maior entendimento dos cenários de consumo. Dados farmacocinéticos mostram que a metabolização da droga em indivíduos varia dentro de uma ampla faixa em uma distribuição gaussiana. Limites de excreção de benzoilecgonina (BE) na urina podem variar, em média, entre 20–60%, enquanto que a proporção de cocaína (COC) excretada inalterada varia de 1 a 15%. Com base nestas informações, uma razão COC/BE de 0,75 representa a situação onde sem tem os limites de 15% de COC e 20% de BE. Valores de COC/BE maiores que 0,75, portanto, podem sugerir ausência de metabolização *in vivo*, ou seja, o aporte de cocaína inalterada diretamente no esgoto. A Figura 4 mostra razões COC/BE em amostras de oito ETE do Distrito Federal.

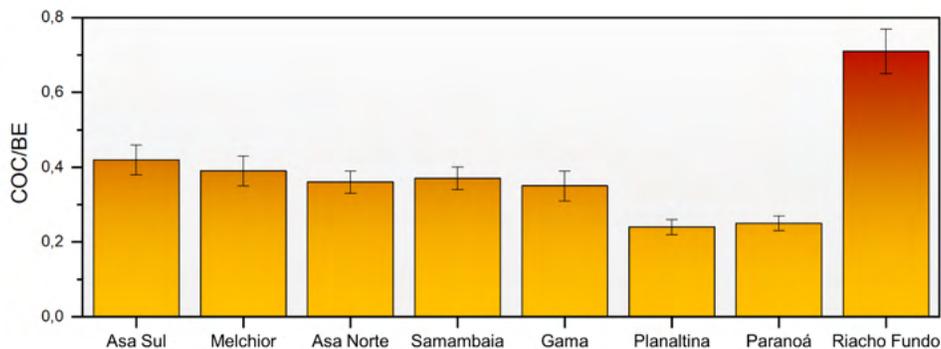


Figura 4. Razões COC/BE medidas em amostras de esgoto de diferentes ETE do Distrito Federal. Adaptado de (SODRÉ, F.F. *et al.*, 2018)

Observa-se uma razão COC/BE mais elevada para a amostra da ETE Riacho Fundo, que se aproxima do limite de 0,75, sugerindo um provável aporte de cocaína no esgoto que não se explica, unicamente, por meio do consumo. Logo, este tipo de informação pode complementar a busca dos órgãos de segurança pública por locais onde a cocaína esteja chegando ao esgoto, sendo despejada em vasos, pias ou ralos, de maneira não-intencional, provavelmente por perdas no transporte ou manuseio em situações de refino ou adulteração da droga.

No caso do consumo concomitante com o álcool, a cocaína metabolizada à cocaetileno (COE) serve como biomarcador para indicar mais características associadas ao perfil do usuário. A variação temporal típica da razão COE/BE é mostrada na Figura 5.

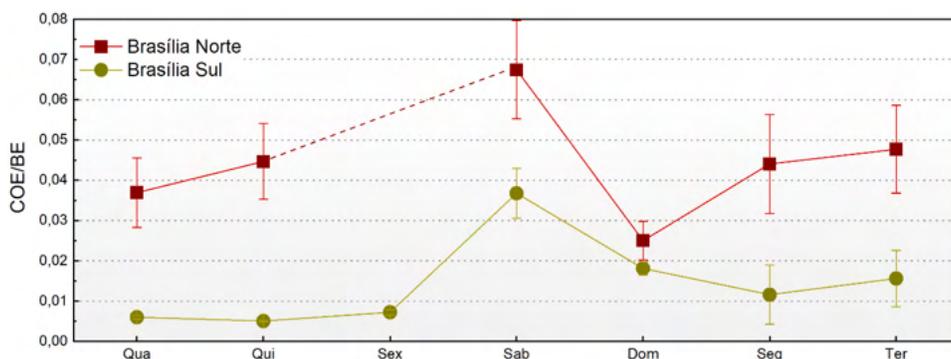


Figura 5. Razões COE/BE medidas em amostras de esgoto das ETE Brasília Norte e Brasília Sul ao longo de uma semana. Adaptado de (DA SILVA *et al.*, 2018)

Valores elevados da razão COE/BE indicam não apenas a existência de usuários que consomem cocaína de modo recreativo e social, mas também uma combinação comum ao poliuso de drogas, que envolve o uso de drogas estimulantes, como a cocaína e as

anfetaminas, associadas a substâncias depressoras do sistema nervoso central, como o etanol. No exemplo mostrado na Figura 5, além dos picos nos finais de semana, parece existir o coconsumo ao longo de dias da semana na região atendida pela ETE Brasília Norte, o que pode ter relação com algum tipo de atividade desenvolvida no local. Este tipo de resultado permite a incorporação de equipes multidisciplinares na tentativa de compreender melhor o perfil do usuário, incorporando, por exemplo, aspectos socioeconômicos aos resultados.

Outra razão de concentrações que pode fornecer informações importantes sobre o perfil de usuários, baseia-se em dois importantes adulterantes da cocaína, a fenacetina (FEN) e o levamisol (LEV), conforme mostrado na Figura 6.

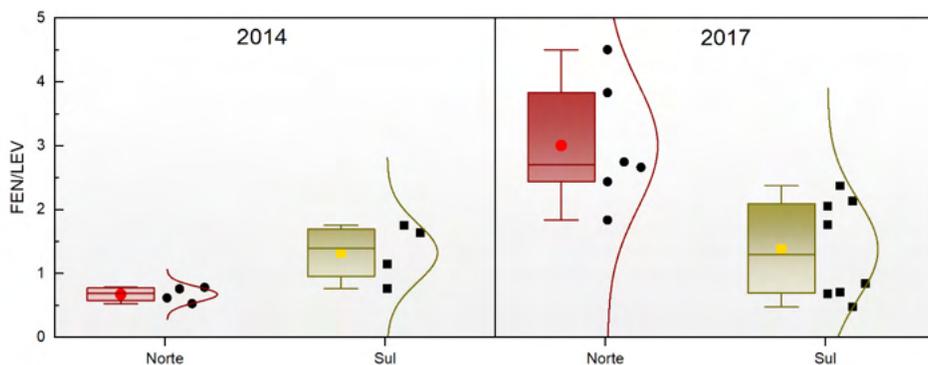


Figura 6. Razões entre as concentrações dos adulterantes da cocaína, fenacetina (FEN) e levamisol (LEV), no esgoto das ETE Brasília Norte e Brasília Sul nos anos de 2014 e 2017. Adaptado de (DA SILVA *et al.*, 2018; SODRÉ, Fernando Fabriz *et al.*, 2017)

O monitoramento de razões FEN/LEV tem sido feito de modo pioneiro no Brasil para acessar a contribuição do uso de *crack*, comumente adulterado com a fenacetina. Embora ainda não seja possível quantificar esta contribuição via EBE, é possível estabelecer análises comparativas, como mostrado na Figura 6. Considerando que valores mais elevados da razão FEN/LEV podem indicar a prevalência do consumo de *crack* em uma determinada região, observa-se que houve uma variação importante quanto a prevalência do consumo em diferentes regiões do Distrito Federal. Enquanto que o consumo parecia ser maior na região atendida pela ETE Brasília Sul em 2014, três anos depois, o uso de *crack* cresceu significativamente na região atendida pela ETE Brasília Norte, mas manteve-se inalterada na região ao sul. Importante mencionar que tais informação foram corroboradas pela Secretaria de Segurança do Distrito Federal, que registrou aumento de *cracolândias* na asa norte de Brasília.

## 5 | PROJETO CLOACINA

Tal como ocorre no Distrito Federal, a ampliação da EBE para um contexto nacional pode contribuir para elucidar, de modo empírico, inúmeros aspectos relacionados à oferta e demanda de drogas de abuso. É nesse contexto que foi proposto a implementação de um projeto nacional de estimativa do uso de drogas pela análise de esgotos. O Projeto CLOACINA, com nome inspirado na deusa da mitologia romana, a Vênus de Cloacina que governaria o principal tronco do complexo sistema romano de coleta de esgotos, a Cloaca Máxima, essencial para manter pessoais saudáveis e livres dos males causados pelo estilo de vida das sociedades urbanas.

A Política Nacional sobre Drogas (PNAD) prevê diversas diretrizes relativas à redução da oferta de drogas, incluindo ações de segurança pública, defesa, inteligência, regulação de substâncias precursoras, de substâncias controladas e de drogas lícitas, de repressão da produção não-autorizada, de combate ao tráfico de drogas, à lavagem de dinheiro e crimes conexos, inclusive por meio da recuperação de ativos que financiem ou sejam resultados dessas atividades criminosas.

O Projeto CLOACINA se integra às ações da Secretaria Nacional de Políticas sobre Drogas (SENAD) que visam a redução de oferta e a execução interinstitucional de políticas públicas sobre drogas, tornando-se uma ferramenta útil, conveniente e oportuna. Por ser um projeto de dimensões nacionais, o Projeto CLOACINA, possui condições para ser inserido diretamente nas diretrizes da PNAD por permitir a obtenção de informações geolocalizadas de substâncias controladas e drogas ilícitas nos esgotos domésticos, permitindo direcionar a repressão, a produção e a manipulação dessas substâncias.

Ainda, no âmbito do Ministério da Justiça e Segurança Pública, o Plano Integrado de Enfrentamento à Criminalidade Violenta, busca promover ações multidisciplinares entre áreas de segurança pública, educação, saúde, dentre outras, de forma coordenada e convergente, por meio de eixos de atuação específicos e de um sistema de governança e gestão integrada, visando a redução de crimes violentos em localidades prioritárias. Neste sentido, a inclusão do Projeto CLOACINA como uma das ações deste plano pode fornecer em tempo real, não apenas dados sobre a dinâmica do consumo de diferentes drogas, mas também informações sobre possíveis locais de manipulação de drogas, distinção da cocaína administrada como pó ou base livre (*crack*) e identificação de drogas sintéticas, dados estes que poderiam inclusive subsidiar um sistema de alerta rápido (SISBAD), também em execução pela SENAD.

A ambição do Projeto CLOACINA é, portanto, utilizar a análise química do esgoto para estimar o consumo de drogas ilícitas e de abuso, contribuindo para a detecção de áreas voltadas à manipulação e produção de drogas e de novas drogas e, potencialmente, avaliar o impacto de ações de redução de oferta, como operações, apreensões, patrulhamentos e investigações policiais. Enfatize-se, ademais, que o planejamento, a execução e a

avaliação de um projeto desta dimensão somente serão bem-sucedidos se acompanhados de um sistema de governança eficiente e articulado.

## 6 | CONSIDERAÇÕES FINAIS

A quantificação de resíduos e metabólitos associados ao uso de drogas de abuso no esgoto é o aspecto chave para a criação de uma ferramenta capaz de estimar, de forma objetiva, a exposição de uma determinada população, em contraponto à subjetividade das informações usualmente disponíveis sobre o tráfico e o consumo de drogas. Cabe mencionar, que estas informações são limitadas pela própria natureza ilícita das atividades. Sendo assim, a análise de amostras de esgotos para drogas e metabólitos, desde que conduzida respeitando-se todos os critérios que garantam confiabilidade aos resultados finais, se coloca como uma importante contribuição da química analítica para a sociedade. Isso se confirma pela importância dos resultados gerados no Brasil até o momento, que já permitiram estimar o consumo *per capita* de cocaína, anfetaminas e canabinoides, mapear o consumo em diferentes regiões do Distrito Federal, acompanhar variações temporais do uso de cocaína, estimar contribuições do crack, avaliar o perfil de usuários, investigar o coconsumo de cocaína e álcool e acompanhar a evolução do consumo de drogas em grandes eventos esportivos e festivos. A EBE avança a passos largos para se consolidar como uma poderosa estratégia para obtenção de informações, em tempo real, sobre o consumo e a produção de drogas, somando-se aos métodos tradicionais utilizados para a coleta de dados sobre drogas de abuso.

## REFERÊNCIAS

CASTIGLIONI, S. *et al.* Evaluation of uncertainties associated with the determination of community drug use through the measurement of sewage drug biomarkers. **Environ Sci Technol**, Washington, v. 47, n. 3, p. 1452–1460, feb. 2013.

CHOI, P. M. *et al.* Considerations for assessing stability of wastewater-based epidemiology biomarkers using biofilm-free and sewer reactor tests. **Sci Total Environ**, Amsterdam, v. 709, p. 136228, mar. 2020.

DA SILVA, K. M. *et al.* Assessing cocaine use patterns in the Brazilian Capital by wastewater-based epidemiology. **Int J Environ Anal Chem**, Londres, v. 98, n. 15, p. 1370–1387, dec. 2018.

DAUGHTON, C. G. Illicit drugs in municipal sewage: proposed new non-intrusive tool to heighten public awareness of societal use of illicit/abused drugs and their potential for ecological consequences. *In*: DAUGHTON, C. G.; JONES-LEPP, T. L. **Pharmaceuticals and care products in the environment: scientific and regulatory issues**. Washington: American Chemical Society, 2001, cap. 20. p. 348–364.

DEVAULT, D. A. *et al.* First evaluation of illicit and licit drug consumption based on wastewater analysis in Fort de France urban area (Martinique, Caribbean), a transit area for drug smuggling. **Sci Total Environ**, Amsterdam, v. 490, p. 970–978, aug. 2014.

MALDANER, A. O. *et al.* Estimating cocaine consumption in the Brazilian Federal District (FD) by sewage analysis. **J Braz Chem Soc**, São Paulo, v. 23, n. 5, p. 861–867, mai. 2012.

MCCALL, A.-K. *et al.* Critical review on the stability of illicit drugs in sewers and wastewater samples. **Water Res**, Amsterdam, v. 88, p. 933–947, jan. 2016.

O'BRIEN, J. W. *et al.* A model to estimate the population contributing to the wastewater using samples collected on census day. **Env Sci Technol**, Washington, v. 48, n. 1, p. 517–525, jan. 2014.

SODRÉ, F. F. *et al.* Wastewater-based epidemiology of cocaine in the Brazilian Federal District: spatial distribution, weekly variation and sample preservation strategies. **J Braz Chem Soc**, São Paulo, v. 29, n. 11, p. 2287–2298, nov. 2018.

SODRÉ, F. F. *et al.* Illicit drugs, metabolites and adulterants in wastewater: monitoring community drug abuse in the Brazilian Federal District during the 2014 Soccer World Cup. **J Braz Chem Soc**, São Paulo, v. 28, n. 11, p. 2146–2154, nov. 2017.

ZUCCATO, E. *et al.* Cocaine in surface waters: a new evidence-based tool to monitor community drug abuse. **Environ Health**, Londres, v. 4, p. 14, aug. 2005.

## SOBRE O ORGANIZADOR

**CLEISEANO EMANUEL DA SILVA PANIAGUA** - Técnico em química pelo Colégio Profissional de Uberlândia (2008), Bacharel em Química pela Universidade Federal de Uberlândia (2010), Licenciado em Química pela Universidade de Uberaba (2011) e em Ciências Biológicas pela Faculdade Única (2021). Especialista em Metodologia do Ensino de Química e em Docência do Ensino Superior pela Faculdade JK Serrana em Brasília (2012). Mestre em Química pela Universidade Federal de Uberlândia (2015), com ênfase em desenvolvimento de bioadsorvente para remoção dos íons metálicos As(V), Sb (III) e Se (IV) em diferentes matrizes aquáticas. Doutor em Química pela Universidade Federal de Uberlândia (2018), com ênfase em Processos Oxidativos Avançados [fotocatálise heterogênea ( $\text{TiO}_2/\text{UV-A}$  e  $\text{TiO}_2/\text{Solar}$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{UV-C}$ ) para remoção de contaminantes de interesse emergente (CIE) em diferentes matrizes aquáticas. Realizou o primeiro estágio Pós-Doutoral (de maio de 2019 a junho de 2021) na Universidade Federal de Uberlândia com ênfase em aplicação de novos agentes oxidantes empregando radiação solar para remoção de CIE em efluentes provenientes de estação de tratamento de esgoto. Atualmente realiza seu segundo Estágio Pós- doutoral (julho de 2021 - atual) na UFU na mesma linha de pesquisa. Cursando Licenciatura em Física na Faculdade única (Setembro de 2021 à Novembro de 2022), cursando pós-graduação *lato sensu* em Ensino de Ciências e Matemática (IFTM/Uberlândia), Análise Instrumental Avançada (Faculdade Unileyva). Possui 11 anos de experiência como técnico em química no Instituto Federal de Goiás, tendo atuado como responsável por análises de parâmetros físico-químicos e biológicos de águas e efluentes provenientes de estação de tratamento de esgoto. Atualmente, vem atuando nas seguintes linhas de pesquisa: (i) Desenvolvimento de novas metodologias para tratamento e recuperação de resíduos químicos gerados em laboratórios de instituições de ensino e pesquisa; (ii) Estudos de monitoramento de CIE; (iii) Desenvolvimento de novas tecnologias avançadas para remoção de CIE em diferentes matrizes aquáticas; (iv) Aplicação de processos oxidativos avançados ( $\text{H}_2\text{O}_2/\text{UV-C}$ ,  $\text{TiO}_2/\text{UV-A}$  e foto-Fenton e outros) para remoção de CIE em efluentes provenientes de estação de tratamento de esgoto para fins de reutilização; (v) Estudo e desenvolvimento de novos bioadsorventes para remediação ambiental de CIE em diferentes matrizes aquáticas; (vi) Educação Ambiental e; (vii) processos de alfabetização e letramento científico na área de Ciência da Natureza, em especial biologia e química

## ÍNDICE REMISSIVO

### A

- Actividade leishmanicida 117
- Adsorção 92, 94, 144
- Agente tamponante 154, 156, 162, 164
- Alfabetização científica 81, 88, 89, 90
- Amostragem 103, 167, 171, 180, 183, 184, 188
- Análise de Componente Principal - PCA 61, 65, 71, 75
- Análise elementar 61, 67
- Antioxidante 107, 108, 130
- Arrhenius 1, 6, 8, 9
- Atividades experimentais 13, 14, 23, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 33, 34, 39, 44
- Avaliação diagnóstica 26, 31, 34, 35, 39, 40

### B

- Bactérias metanogênicas 154, 156
- Biodiesel 145, 154, 155, 156, 157, 158, 161, 162, 163, 164, 165, 166
- Bioetanol 143, 144, 145
- Biomassa 144

### C

- Células de combustível 143
- Ciências da natureza 2, 24, 83, 90
- Citometria de fluxo 117
- Citotoxicidade 108, 117
- Cocaína 178, 179, 180, 181, 182, 189, 190, 192, 193, 194, 195, 196, 197, 198, 199
- Conhecimento científico 1, 3, 46, 80, 82, 83, 84, 85, 86, 89
- Contaminantes de interesse emergente 178, 179, 180, 201
- Crack 180, 181, 189, 197, 198, 199
- Cromatografia gasosa 158, 159, 167, 172
- Cromonas 132, 133, 134, 135

### D

- Docência 78, 80, 87, 201

## **E**

Educação ambiental 46, 52, 54, 55, 58, 59, 60, 78, 89, 201

Efeito estufa 167, 168, 169, 176, 177

Efluente 154, 155, 156, 163, 165, 169

Eletrodeposição 91, 96, 97, 98, 105

Energia renovável 144

Ensino de ciências 20, 24, 25, 38, 52, 54, 55, 59, 60, 78, 82, 83, 88, 89, 90, 201

Ensino de química 1, 2, 10, 14, 25, 26, 27, 32, 33, 37, 38, 39, 42, 43, 44, 47, 50, 51, 52, 81, 84, 85, 89, 90, 201

Enzima 122

Espectrofotômetro UV-Vis 107, 111

Espectrometria de fluorescência de raios x 61, 69, 75

Espectroscopia na região do infravermelho 107, 110, 113

Extração por Sorção em Barra de Agitação - SBSE 91, 92, 102, 106

## **H**

Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos - HPAs 91, 92

Hidrólise 98, 180, 181, 191

## **I**

Intervenção pedagógica 1, 3, 10

## **L**

Lago Paranoá 167, 169, 173, 174, 175

Lei de Diretrizes e Base da Educação - LDB 2

Letramento científico 78, 80, 81, 83, 87, 88, 89, 90, 201

Licenciatura em química 42, 51, 52, 78, 80, 85, 86, 88

Lixo 46, 51, 52, 53, 54, 55, 57, 60

## **M**

Meio ambiente 45, 46, 47, 48, 50, 53, 55, 59, 60, 98, 155

Metabólitos 133, 180, 181, 183, 199

Microscopia Eletrônica de Transmissão - MET 107, 110, 112

Microscopia Eletrônica de Varredura - MEV 144

## **N**

Nanomateriais 114

Nanotecnologia 107

## O

Óleo de cozinha 42, 46, 47, 48, 50, 51

Oxirredução 26, 28, 38, 98, 107, 108

## P

Parâmetros Curriculares Nacionais - PCN 2, 14, 27, 38, 51, 81

Pigmentos rupestres 61, 63, 64, 69, 70, 75

Poluição ambiental 53, 55

Potencial farmacológico 132

Potencial zeta 107, 110, 114

Processo anaeróbio 154, 157, 160, 164

Processo de aprendizagem 9, 14, 43, 50, 78, 84, 87

Produtos de metabolização 178, 183

## R

Reação de ciclização eletrofílica 132, 138, 141

Reação de condensação do tipo Perkin 117

Reação de oxidação 30, 36, 144

Reciclagem 42, 45, 46, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 105

Recursos audiovisuais 6, 13, 14, 15

Rede federal de ensino 78, 88

Resíduos de drogas de abuso 178

Resíduos sólidos 45, 46, 52, 53, 54, 55, 56, 60

## S

Sabão ecológico e artesanal 42

Sedimentos finos 167, 174, 175

Síntese verde 107, 108

Sítios arqueológicos 61, 63, 64, 65, 69, 70, 71, 74, 75, 76, 77

Solventes tóxicos 132

Substrato metálico 91, 94, 98, 105

## T

Técnica de *headspace* 167

Teor carbono orgânico 167

Tratamento biológico 154, 156

## V

Voltametria cíclica 144

# O ensino e a pesquisa em **QU** **MICA**

# 3

 [www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br)  
 [contato@atenaeditora.com.br](mailto:contato@atenaeditora.com.br)  
 @atenaeditora  
 [www.facebook.com/atenaeditora.com.br](https://www.facebook.com/atenaeditora.com.br)

  
Editora  
Ano 2021

# O ensino e a pesquisa em **QU** **MICA**

# 3

 [www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br)  
 [contato@atenaeditora.com.br](mailto:contato@atenaeditora.com.br)  
 @atenaeditora  
 [www.facebook.com/atenaeditora.com.br](https://www.facebook.com/atenaeditora.com.br)

  
Editora  
Ano 2021