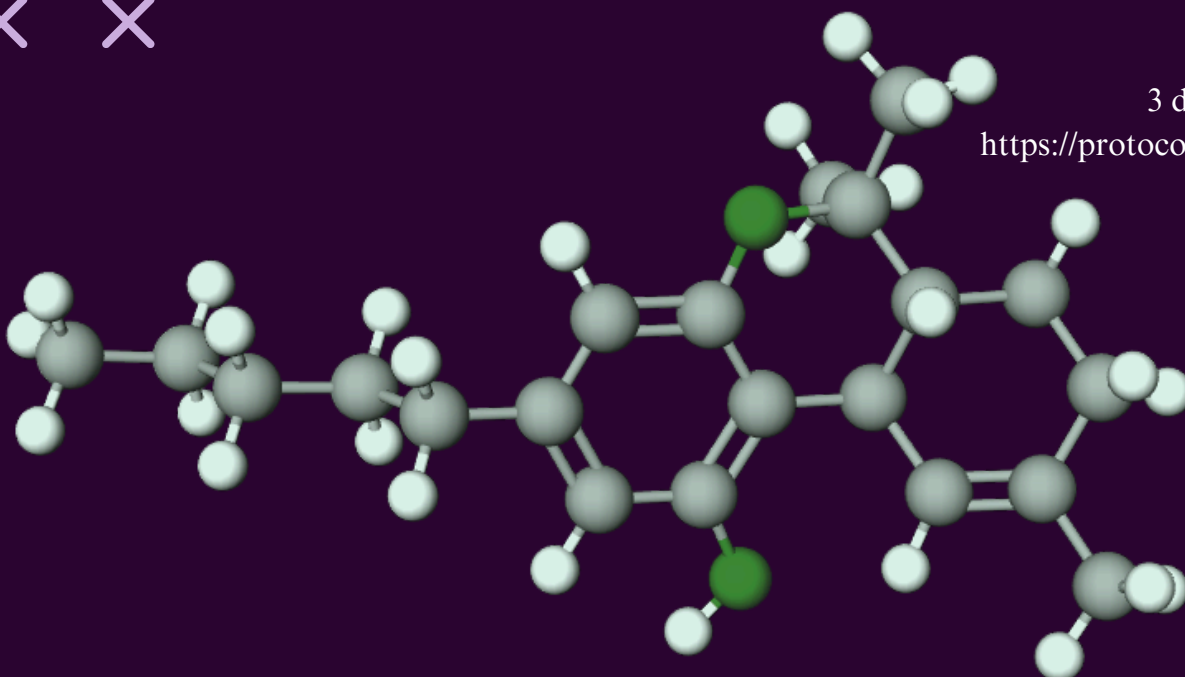


# Protocolos em Química

Vol. 4  
Nº. 1

3 de fevereiro de 2026

<https://protocolosemquimica.com/>



POR PET-QUÍMICA IQ/UNB

Revista científica editorada pelos estudantes dos cursos do Instituto de Química da Universidade de Brasília com o objetivo de divulgar textos de pesquisa, de ensino, artigos de revisão e os chamados QuiArtigos, que são artigos escritos exclusivamente por estudantes de graduação.



# SUMÁRIO

Sobre o projeto.....	03
Editoração.....	04
<b>Seção Pesquisa:</b>	
Efeito de Solvatação e Vizinhança Iônica sobre Indigóides.....	06
<b>Seção QuiArtigo:</b>	
Aproveitamento energético do biogás em Estações de Tratamento de Esgoto.....	10
Cálculo de energia eletrônica molecular via Variational Quantum Eigensolver (VQE).....	14
Cannabis medicinal no Brasil: avanços regulatórios, desafios produtivos e soberania tecnológica.....	20
Da Tabela Periódica à Soberania Nacional: Uma Análise Crítica sobre os Elementos Estratégicos do Brasil.....	27
Quimiometria e infravermelho: uma análise forense para falsificação do papel moeda brasileiro.....	32
Uso de nanopolímero magnético a base de carbono para adsorção de metais pesados em águas contaminadas.....	38
Waterless Cosmetics: a nova tendência sustentável dos cosméticos.....	43



# SOBRE O PROJETO

A Revista Protocolos em Química é um projeto desenvolvido pelo grupo PET-Química/IQ/UnB/MEC visando proporcionar aos seus PETianos, aos discentes do Instituto de Química da Universidade de Brasília e aos demais jovens pesquisadores de áreas correlatas, a inserção de resultados próprios de suas pesquisas em um periódico idiomáticamente acessível e gratuito. Assim, revisões, resenhas, resultados de pesquisas, de trabalhos de Iniciação Científica, de Técnicas de Pesquisa, entre outros trabalhos, podem ser divulgados neste periódico após revisão por pares.

Dessa forma, ela conta com quatro seções, sendo elas: seção pesquisa, seção artigos de revisão, seção ensino e seção QuiArtigo. Dessa forma, na primeira seção poderão ser submetidos trabalhos de pesquisa, inéditos ou não, que visam a divulgação e ampliação do conhecimento químico. A segunda seção é destinada àqueles que desejam apresentar um levantamento de informações a respeito de alguma temática relacionada à Química, analisando-a e discutindo os dados apresentados com uma visão crítica. Na terceira seção, poderão ser submetidos trabalhos de pesquisa na área de ensino de química em todos os níveis de ensino, que considerem a devida relação entre o referencial teórico, o método e a técnica de análise dos dados. Por fim, a quarta seção é exclusiva aos estudantes de graduação e pós-graduação em Química: a seção QuiArtigo. Inicialmente, o QuiArtigo era um trabalho apenas do PET-Química/UnB/MEC, onde cada membro do grupo escrevia uma resenha crítica descrevendo um tema de difícil entendimento por parte do grande público, de uma forma mais acessível sem perder o caráter acadêmico.

Porém, o projeto foi ressignificado para aceitar os trabalhos de outros discentes. Diante disto, sejam todos muito bem-vindos!



# EDITORACÃO

**Prof. Dr. Davi Alessandro Cardoso Ferreira**

Tutor do Grupo PET-Química/UnB, professor do Instituto de Química (IQ), pela Divisão de Físico-Química, na Universidade de Brasília (UnB) e idealizador da Revista Protocolos em Química

**Atos de Jesus Silva**

Estudante de Licenciatura em Química na Universidade de Brasília (IQ/UnB) e membro do grupo PET-Química.

**Anthony Monteiro**

Estudante de Química Tecnológica na Universidade de Brasília (IQ/UnB) e membro do grupo PET-Química.

**Bruna Seguins**

Estudante de Química Tecnológica na Universidade de Brasília (IQ/UnB) e membro do grupo PET-Química.

**Catarina Sampaio**

Estudante de Bacharelado em Química na Universidade de Brasília (IQ/UnB) e membro do grupo PET-Química.

**Gabriel Castro**

Estudante de Engenharia Química na Universidade de Brasília (IQ/UnB) e membro do grupo PET-Química.





**Hellen Ferreira**

Estudante de Engenharia Química na Universidade de Brasília (IQ/UnB) e membro do grupo PET-Química.

**Iago Cezario**

Estudante de Engenharia Química na Universidade de Brasília (IQ/UnB) e membro do grupo PET-Química.

**Julia Ribeiro**

Estudante de Engenharia Química na Universidade de Brasília (IQ/UnB) e membro do grupo PET-Química.

**Larissa Cavalcante**

Estudante de Licenciatura em Química na Universidade de Brasília (IQ/UnB) e membro do grupo PET-Química.

**Linara Tarusa**

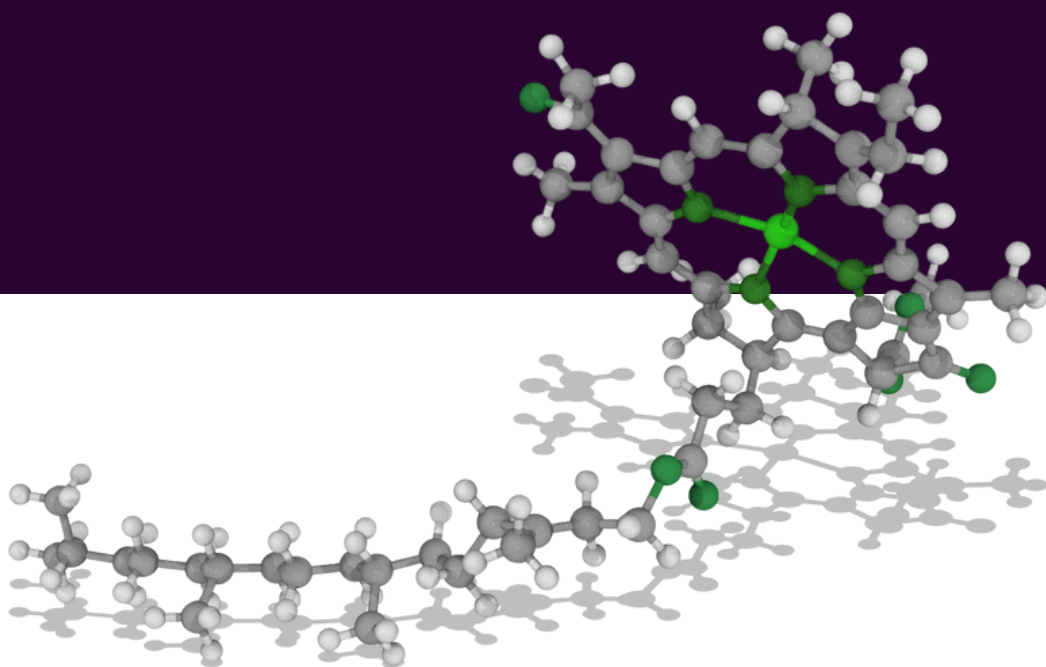
Estudante de Licenciatura em Química na Universidade de Brasília (IQ/UnB) e membro do grupo PET-Química.

**Pedro Henrique Carvalho**

Estudante de Química Tecnológica na Universidade de Brasília (IQ/UnB) e membro do grupo PET-Química.

**Victoria Pires**

Estudante de Engenharia Química na Universidade de Brasília (IQ/UnB) e membro do grupo PET-Química.



# Efeito de Solvatação e Vizinhança Iônica sobre Indigóides

DOI: 10.5281/zenodo.18458755

Bruna Seguins de Paula<sup>a\*</sup>

Indigoids are a class of compounds with significant historical and technological relevance, whose electronic and optical properties are strongly affected by the chemical environment. In this work, the effects of aqueous solvation and ionic neighborhood on indigo and halogen-disubstituted indigoids (F, Cl, Br, and I) are investigated using computational approaches based on density functional theory, molecular dynamics, and electronic spectroscopy calculations. The results show that solvation preferentially occurs through hydrogen bonding with carbonyl groups. In addition, the absorption bands related to colorimetric properties remain located in the region associated with the HOMO–LUMO transition, even in the presence of ions in solution. The agreement with experimental data reported in the literature demonstrates the reliability of the adopted methodology and highlights its applicability for predicting the spectroscopic behavior of novel indigoid systems.

Os indigóides constituem uma classe de compostos de grande relevância histórica e tecnológica, cujas propriedades eletrônicas e ópticas são fortemente influenciadas pelo meio químico. Neste trabalho, investigam-se os efeitos da solvatação aquosa e da vizinhança iônica sobre o índigo e indigóides duplamente substituídos por halogênios (F, Cl e Br), empregando métodos computacionais baseados em teoria do funcional da densidade, dinâmica molecular e cálculos de espectroscopia eletrônica. Os resultados indicam que a solvatação ocorre preferencialmente por meio de ligações de hidrogênio com os grupos carbonila. Observa-se ainda que as bandas associadas às propriedades colorimétricas permanecem concentradas na região correspondente à transição HOMO–LUMO, mesmo na presença de íons em solução. A concordância com dados experimentais reportados na literatura confirma a robustez da abordagem adotada, evidenciando seu potencial para a previsão do comportamento espectroscópico de novos sistemas indigóides.

<sup>b</sup>Laboratório de Dinâmica e Reatividade Molecular (LDRM).

<sup>a</sup>Universidade de Brasília (UnB). Campus Darcy Ribeiro. Instituto de Química (IQ/UnB).

\*E-mail: brunaseguins01@gmail.com

**Palavras-chave:** indigóides; solvatação; espectroscopia UV-Vis; DFT; dinâmica molecular.

Recebido em 11 de janeiro de 2026,

Aprovado em 30 de janeiro de 2026,

Publicado em 03 de fevereiro de 2026.

## Introdução

Os indigóides são compostos orgânicos caracterizados por um arcabouço molecular semelhante ao do corante índigo, cuja relevância histórica remonta a aplicações pigmentares em diferentes civilizações antigas.<sup>1-3</sup> Além de sua importância cultural e arqueológica, essa classe de moléculas tem despertado crescente interesse científico e tecnológico em virtude de suas propriedades eletrônicas e ópticas singulares.<sup>4,5</sup> Em particular, a elevada conjugação  $\pi$  presente nos indigóides confere forte absorção na região do visível, estabilidade eletrônica e versatilidade redox, características que viabilizam aplicações em semicondutores orgânicos, dispositivos optoeletrônicos, fotossensibilização e armazenamento de energia.<sup>4,8</sup>

Do ponto de vista químico, os indigóides apresentam múltiplos estados de oxidação e protonação, o que resulta em

uma diversidade de espécies com propriedades espectroscópicas e reativas distintas.<sup>4,8</sup> Essa versatilidade explica, por exemplo, as diferenças observadas entre o índigo clássico e materiais arqueológicos como o azul maia, nos quais processos de solvatação, interação com argilas e efeitos de vizinhança iônica levam a alterações significativas na resposta óptica e na estabilidade do pigmento.<sup>1,2</sup> Estudos anteriores demonstram que a interação do índigo com o meio pode modificar mecanismos de tautomerização e transferência de carga, impactando diretamente a percepção de cor.<sup>1,9</sup>

Nesse contexto, compreender como a solvatação e a presença de íons modulam as propriedades eletrônicas dos indigóides é essencial tanto para a interpretação de sistemas históricos quanto para o desenvolvimento de novas aplicações tecnológicas.<sup>4-8</sup> Trabalhos recentes têm explorado, por meio de abordagens experimentais e teóricas, a influência do ambiente químico sobre a estrutura eletrônica desses

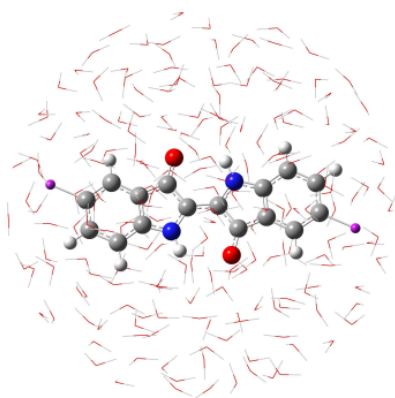
compostos, evidenciando a importância de métodos computacionais avançados para a descrição dessas interações<sup>9</sup>. Assim, o presente estudo investiga sistematicamente o efeito da solvatação aquosa e da vizinhança iônica sobre o índigo e indigóides halogenados, com foco na correlação entre estrutura molecular, interação com o solvente e resposta espectroscópica.

## Metodologia

As geometrias dos sistemas indigóides investigados foram inicialmente otimizadas utilizando métodos baseados na Teoria do Funcional de Densidade (DFT), empregando o funcional híbrido B3LYP com correção dispersiva D3 e conjunto de bases def2-TZVPP.<sup>5-8</sup> Essa abordagem permite uma descrição adequada das interações intramoleculares e intermoleculares, incluindo efeitos de dispersão relevantes para sistemas conjugados.

Em seguida, foram realizadas simulações de dinâmica molecular por metadinâmica no ensemble NVT, utilizando o termostato de Nosé–Hoover para controle de temperatura em 298,16 K.<sup>10-13</sup> As simulações consideraram uma janela temporal de 5 ps, dividida em 10.000 passos de 0,5 fs, e foram conduzidas com o método xTB, apropriado para o tratamento eficiente de sistemas de tamanho moderado.<sup>14,15</sup> Para a descrição explícita da solvatação, foram consideradas aproximadamente 200 moléculas de água distribuídas em uma esfera de raio 0,9 nm ao redor do soluto.

**Figura 1.** Arranjo de 200 moléculas de H<sub>2</sub>O em uma esfera de raio  $r=0,9$  nm.



Os espectros de absorção UV-Vis foram obtidos para os sistemas otimizados e para as estruturas extraídas das simulações dinâmicas, considerando a solvatação implícita pelo modelo SMD. Os cálculos espectroscópicos foram realizados por meio da metodologia STEOM-DLPNO-CCSD(T) com conjunto de bases aug-cc-pVTZ, garantindo elevada precisão na descrição das transições eletrônicas.<sup>16</sup> Todos os cálculos foram executados com os pacotes Gaussian 09 e ORCA 5, e as visualizações estruturais foram realizadas com os programas ChemCraft e GaussView.

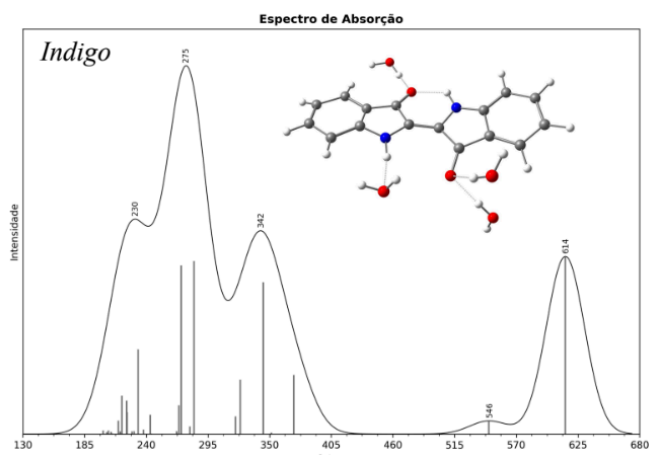
## Resultados e discussão

Os resultados das simulações indicam que, para todos os sistemas analisados, a solvatação ocorre preferencialmente por meio de ligações de hidrogênio entre as moléculas de água e os grupos carbonila dos indigóides. Esse comportamento é consistente com estudos prévios que apontam esses grupos funcionais como sítios preferenciais de interação solvente-soluto em sistemas conjugados.<sup>1,2,9</sup>

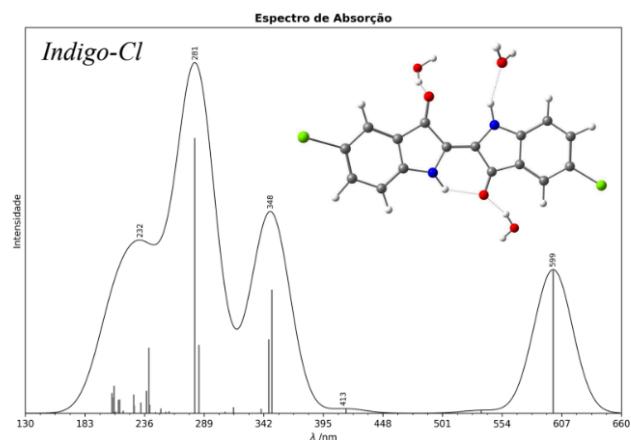
A análise dos espectros eletrônicos revela que as bandas associadas às características colorimétricas dos indigóides em solução aquosa permanecem localizadas na mesma região espectral, correspondente à transição eletrônica HOMO–LUMO. Esse resultado está em concordância com observações experimentais relatadas para o índigo e a púrpura tíria, nas quais a solvatação não promove deslocamentos significativos das bandas principais de absorção.<sup>1-3</sup>

Em particular, foi observada elevada similaridade entre os espectros calculados para o índigo e aqueles reportados experimentalmente na literatura, reforçando a capacidade preditiva da abordagem computacional adotada. A presença de íons carbonato e Ca<sup>2+</sup> em solução não resultou em alterações expressivas nas posições das bandas, sugerindo que, nas condições investigadas, os efeitos de vizinhança iônica são menos pronunciados do que as interações diretas com o solvente.

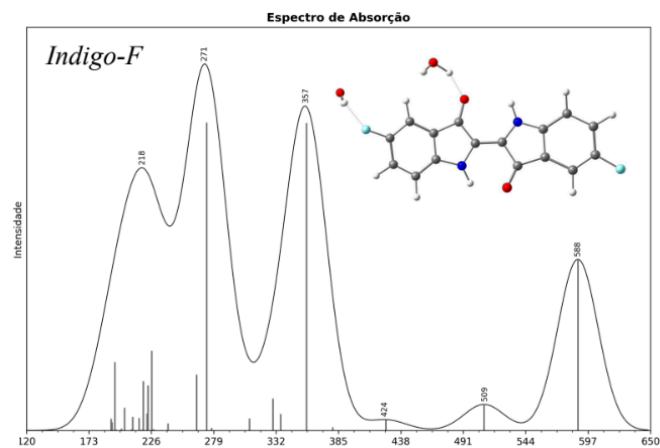
**Figura 2.** Espectro de absorção do índigo.



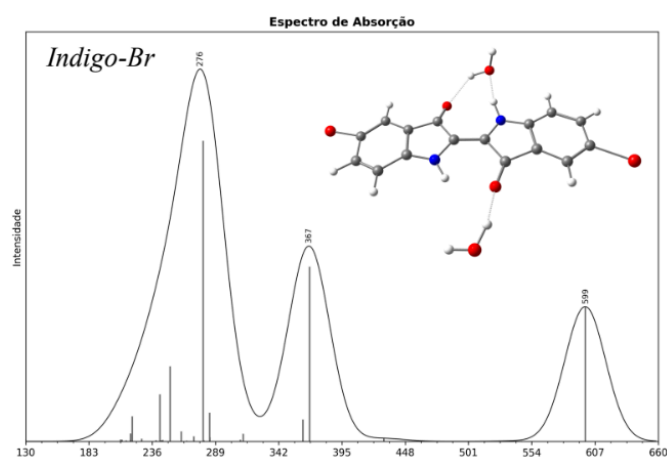
**Figura 3.** Espectro de absorção do índigo e Cloro. Autoral.



**Figura 4.** Espectro de absorção do índigo e Flúor. Autoral.



**Figura 5.** Espectro de absorção do índigo e Boro. Autoral.



## Conclusões

Neste trabalho, investigamos os efeitos de solvatação e vizinhança iônica sobre as propriedades eletrônicas e espectroscópicas do índigo e de indigóides halogenados por meio de uma abordagem computacional multiescala. Os resultados indicam que a solvatação aquosa ocorre predominantemente via ligações de hidrogênio com os grupos carbonila, enquanto as transições eletrônicas responsáveis pela coloração permanecem concentradas na região associada à transição HOMO–LUMO.

A concordância entre os resultados teóricos e dados experimentais previamente reportados na literatura demonstra que a estratégia empregada é adequada para a previsão do



comportamento colorimétrico de sistemas indigóides em solução. Estudos futuros poderão explorar novos derivados e investigar efeitos de impregnação em matrizes sólidas, ampliando a compreensão das interações intermoleculares responsáveis pela estabilidade e pelas propriedades ópticas desses sistemas.

## Contribuições por Auto

A autora Bruna Segui de Paula contribuiu com a realização dos cálculos, análise dos resultados, definição da metodologia, concepção do trabalho e redação do manuscrito.

## Conflito de interesse

Não há conflito de interesses.

## Agradecimentos

Agradeço ao PET Química do Instituto de Química da Universidade de Brasília (IQ/UnB), com apoio do MEC, pela oportunidade de integrar o grupo. Agradeço ao Laboratório de Dinâmica e Reatividade Molecular (LDRM) pela infraestrutura disponibilizada e ao professor Doutor Davi Alexandre C. Ferreira pela orientação e apoio científico ao longo do desenvolvimento deste trabalho.

## Referências

1. A. Doménech-Carbó, J. Aura-Castro, M. Doménech-Carbó, *J. Phys. Chem. C*, 2021, **125**, 26188–26200.
2. G. Festa, F. Puntoriero, S. Campagna, *Molecules*, 2022, **27**, 1–18.
3. C. J. Cooksey, *Molecules*, 2001, **6**, 736–769.
4. X. Wang, Y. Wang, J. Zhang, *ACS Energy Lett.*, 2022, **7**, 1178–1186.
5. S. S. Shenouda, A. M. El-Sayed, *Phys. B: Condens. Matter*, 2022, **634**, 413787.
6. P. Keshtiara, M. Rahimi, A. Zare, *ACS Appl. Nano Mater.*, 2023, **6**, 1261–1271.
7. J. A. Shriver, K. J. Stevenson, *RSC Adv.*, 2022, **12**, 5407–5414.
8. Z. Li, Y. Chen, H. Wang, *Nat. Commun.*, 2025, **16**, 3206.
9. C. A. Guido, M. A. Rohrdanz, D. L. Mobley, *J. Chem. Theory Comput.*, 2021, **17**, 5155–5164.
10. A. Laio, M. Parrinello, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 2002, **99**, 12562–12566.
11. W. G. Hoover, *Phys. Rev. A*, 1985, **31**, 1695–1697.
12. S. Nosé, *J. Chem. Phys.*, 1984, **81**, 511–519.
13. D. J. Evans, B. L. Holian, *J. Chem. Phys.*, 1985, **83**, 4069–4074.
14. C. Bannwarth, S. Ehlert, S. Grimme, *WIREs Comput. Mol. Sci.*, 2021, **11**, e1493.
15. C. Bannwarth, S. Ehlert, S. Grimme, *J. Chem. Theory Comput.*, 2019, **15**, 1652–1671.
16. D. G. Liakos, F. Neese, *J. Chem. Theory Comput.*, 2015, **11**, 1525–1539.

# Aproveitamento energético do biogás em Estações de Tratamento de Esgoto

DOI: 10.5281/zenodo.18462191

Julia Ribeiro Dias<sup>a\*</sup>

The energy recovery of biogas in Wastewater Treatment Plants (WWTPs) stands out as an alternative to reduce operational costs, mitigate greenhouse gas emissions, and promote sustainability in the sanitation sector. This study conducts a critical analysis of the article by Bilotta and Ross (2016), which estimated electricity generation and avoided methane emissions in a large-scale WWTP, complemented by recent studies from Brazilian literature. The methodology was based on a critical review of scientific works, enabling the comparison of results, identification of methodological limitations, and evaluation of the applicability of biogas recovery in different national contexts. The results indicate that biogas rarely meets the entire energy demand of WWTPs, but it can ensure significant partial self-sufficiency and environmental benefits. It is concluded that this strategy is viable and aligned with sustainable development, requiring greater institutional and technological support.

O aproveitamento energético do biogás em Estações de Tratamento de Esgoto (ETEs) destaca-se como alternativa para reduzir custos operacionais, mitigar emissões de gases de efeito estufa e promover a sustentabilidade no setor de saneamento. Este estudo realiza uma análise crítica do artigo de Bilotta e Ross (2016), que estimou a geração de energia elétrica e a emissão evitada de metano em uma ETE de grande porte, complementada por estudos recentes da literatura brasileira. A metodologia baseou-se na revisão crítica de trabalhos científicos, permitindo a comparação de resultados, a identificação de limitações metodológicas e a avaliação da aplicabilidade do aproveitamento do biogás em diferentes contextos nacionais. Os resultados indicam que o biogás dificilmente supre toda a demanda energética das ETEs, mas pode garantir autossuficiência parcial relevante e benefícios ambientais. Conclui-se que essa estratégia é viável e alinhada ao desenvolvimento sustentável, exigindo maior apoio institucional e tecnológico.

<sup>a</sup>Universidade de Brasília (UnB). Campus Darcy Ribeiro. Instituto de Química (IQ/UnB).

\*E-mail: juliariberdias@gmail.com

**Palavras-chave:** biogás; aproveitamento energético; estações de tratamento de esgoto.

Recebido em 11 de janeiro de 2026,

Aprovado em 25 janeiro de 2026,

Publicado em 03 de fevereiro de 2026.

## Introdução

De acordo com dados do Anuário Estatístico de Energia Elétrica 2025, trazendo dados referentes ao ano-base 2024, publicados pela Empresa de Pesquisa Energética (EPE), o consumo total de energia elétrica no Brasil foi de 561,6 TWh, cerca de 5,6% maior do que no ano anterior.<sup>1</sup> Nesse contexto, a ampliação da participação de fontes renováveis na matriz energética nacional torna-se estratégica, destacando-se o biogás como uma alternativa ainda pouco explorada, especialmente no setor de saneamento.

O biogás é uma mistura gasosa composta principalmente por metano (CH<sub>4</sub>) e dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), gerada a partir da degradação anaeróbica da matéria orgânica por microrganismos. No contexto do tratamento de esgotos, o biogás é produzido em reatores anaeróbios, como os reatores UASB, sendo o metano o principal responsável pelo seu

potencial energético. Quando devidamente recuperado e aproveitado, o biogás pode ser utilizado para a geração de energia elétrica e térmica, além de contribuir para a redução das emissões de gases de efeito estufa associadas à liberação direta do metano na atmosfera.<sup>3</sup>

As Estações de Tratamento de Esgoto (ETEs), tradicionalmente concebidas como unidades de controle ambiental e sanitário, caracterizam-se pelo elevado consumo de energia elétrica, o que as tornam sistemas intensivos do ponto de vista energético. Nesse contexto, essas unidades passam a ser reconhecidas também como potenciais fontes de geração de energia renovável, em especial em razão da produção de biogás resultante dos processos de digestão anaeróbica da matéria orgânica presente no esgoto.<sup>5</sup> Tal potencial é particularmente significativo em sistemas como os reatores UASB (*Upflow Anaerobic Sludge Blanket*) e outros sistemas anaeróbios específicos, nos quais o aproveitamento

energético do biogás surge como alternativa estratégica para a redução dos custos operacionais e dos impactos ambientais associados ao tratamento de esgotos.<sup>4</sup>

Diante do crescimento da demanda energética e da crescente necessidade de ampliação do uso de fontes renováveis, este trabalho tem como objetivo realizar uma análise crítica do artigo de referência, o qual se destaca por quantificar o potencial energético do biogás gerado em uma Estação de Tratamento de Esgoto (ETE) de grande porte, bem como por estimar a redução das emissões de gases de efeito estufa associadas à recuperação desse biogás. Além disso, os resultados apresentados são confrontados com pesquisas mais recentes, com o propósito de discutir os avanços alcançados, as limitações identificadas e as perspectivas futuras para o aproveitamento energético do biogás em ETEs no contexto brasileiro.<sup>2</sup>

Metodologia

No presente estudo, como forma de fomentar os resultados e conclusões, teve como base uma revisão bibliográfica crítica, utilizando as bases de dados Google Acadêmico, Scielo e Periódico CAPES. Com as seguintes palavras chave: “biogás”, “processo anaeróbio” e “energia elétrica”.

O artigo em referência fez um estudo de caso quantitativo detalhado da produção de metano, da geração de energia elétrica e da emissão evitada de gases de efeito estufa em uma ETE real. A metodologia adotada no referido estudo baseia-se na estimativa da produção de metano a partir da remoção de matéria orgânica no tratamento anaeróbio, utilizando balanços de DQO e nos métodos propostos pelo *Intergovernmental Panel on Climate Change* (IPCC). A partir da estimativa do volume de metano produzido, os autores calcularam o potencial energético do biogás e avaliaram a possibilidade de geração de energia elétrica, considerando rendimentos típicos de conversão energética. Além disso, foram estimadas as emissões de metano evitadas com a recuperação e o aproveitamento do biogás.<sup>2</sup>

Para complementar a análise crítica, foi utilizado como referência o estudo de Azevedo et al. (2024), que realizou uma revisão da produção científica nacional sobre geração de energia elétrica a partir do biogás em ETEs. Esses estudos foram selecionados por apresentarem resultados consolidados sobre a viabilidade técnica e ambiental do aproveitamento energético do biogás em diferentes realidades operacionais.<sup>5</sup>

Tabela 1. Principais variáveis utilizadas na estimativa do potencial energético do biogás em Estações de Tratamento de Esgoto. Extraído da referência 2.

Variáveis	Descrição	Unidade
Vazão média afluente	Volume médio de esgoto que ingressa diariamente na estação de tratamento	m³/d
DQO afluente	Concentração média de demanda química de oxigênio do esgoto bruto afluente	mg/L
DQO efluente	Concentração média de demanda química de oxigênio do esgoto tratado	mg/L
DQO removida	Fração da carga orgânica removida durante o tratamento anaeróbio	mg/L
Temperatura do reator	Temperatura média de operação do reator anaeróbio	°C
Poder calorífico inferior do metano	Quantidade de energia liberada na combustão do metano disponível no biogás	MJ/kg
Eficiência de conversão elétrica	Eficiência adotada para a conversão da energia química do biogás em energia elétrica	%

No presente estudo, não foram realizados novos cálculos ou simulações. Os resultados do artigo base foram analisados de forma crítica, buscando-se compreender a consistência das estimativas, as hipóteses adotadas e as limitações associadas à utilização de parâmetros não monitorados diretamente. A discussão foi conduzida por meio da comparação dos resultados obtidos e com os achados de estudos mais recentes, permitindo identificar convergências, divergências e desafios relacionados à aplicação prática do aproveitamento energético do biogás em ETEs.

Resultados e discussão

Os resultados apresentados evidenciam o elevado consumo de energia elétrica da Estação de Tratamento de

Esgoto analisada, conforme apresentado na Tabela 2, que demonstra a demanda energética mensal da unidade. Esse resultado confirma que as ETEs se configuram como sistemas intensivos em consumo de energia, sobretudo em estações de grande porte, onde processos de aeração, bombeamento e recirculação representam parcelas significativas da demanda elétrica total.

**Tabela 2.** Consumo mensal de energia elétrica na ETE Santa Quitéria. Extraído da referência 2.

Ano	Mês	Energia consumida (kwh/mês)
2012	Agosto	108.877
	Setembro	124.969
	Outubro	156.994
	Novembro	113.245
	Dezembro	70.689
2013	Janeiro	115.022
	Fevereiro	111.050
	Março	82.395
Valor médio		110.405 ± 26.122

Com base nos dados operacionais e nos parâmetros adotados da literatura, o artigo base estimou o potencial de geração de energia elétrica a partir do biogás produzido nos reatores anaeróbios da ETE, indicando que a recuperação do metano poderia suprir aproximadamente 59% do consumo médio mensal de energia da estação. Esse resultado revela que, embora o aproveitamento energético do biogás não seja suficiente para garantir autossuficiência energética total, ele apresenta capacidade significativa de reduzir a dependência da rede elétrica convencional e, consequentemente, os custos operacionais da unidade.

Além dos benefícios energéticos, destaca-se o impacto ambiental positivo associado à recuperação do biogás, sobretudo pela mitigação das emissões de metano.<sup>2</sup> Considerando o elevado potencial de aquecimento global do CH<sub>4</sub>, a sua queima controlada ou conversão em energia elétrica representa uma estratégia eficaz para a redução das emissões de gases de efeito estufa no setor de saneamento. Esse aspecto reforça a importância do aproveitamento energético do biogás não apenas sob a ótica econômica, mas também ambiental.

Os resultados do artigo base encontram respaldo em diversos estudos nacionais recentes. Uma revisão realizada demonstra que múltiplas pesquisas brasileiras reportaram êxito na recuperação e no aproveitamento energético do biogás em ETEs, com percentuais de atendimento da demanda energética variando de acordo com o porte da estação, o tipo de reator anaeróbio e as condições operacionais.<sup>5</sup> Observou-se redução significativa no consumo de energia elétrica proveniente da rede, associada a benefícios em termos de sustentabilidade e mitigação de emissões atmosféricas.<sup>7</sup>

Entretanto, a análise crítica do estudo base evidencia algumas limitações que devem ser consideradas. A principal refere-se à utilização de valores médios da literatura para variáveis não monitoradas, como perdas de metano e coeficientes de conversão, o que pode introduzir incertezas nas estimativas. Trabalhos mais recentes apontam que a perda de metano dissolvido no efluente pode ser superior à considerada em estimativas teóricas, reduzindo o volume efetivamente disponível para recuperação energética.<sup>5,6</sup>

Outro aspecto relevante diz respeito à viabilidade prática da implantação de sistemas de aproveitamento energético do biogás. Embora o potencial técnico seja significativo, sua concretização depende de investimentos em infraestrutura, sistemas de vedação adequados, manutenção contínua e capacitação operacional. Esses fatores são recorrentes na literatura como desafios à disseminação do aproveitamento energético do biogás em ETEs brasileiras, especialmente em estações de pequeno e médio porte.<sup>4,5</sup>

Dessa forma, os resultados analisados indicam que o aproveitamento energético do biogás em estações de tratamento de esgoto é tecnicamente viável e ambientalmente vantajoso, porém condicionado a fatores operacionais, econômicos e institucionais. A integração entre os resultados do artigo base e as evidências apresentadas na literatura recente reforça o papel estratégico do biogás como fonte de energia renovável no setor de saneamento, ao mesmo tempo em que evidencia a necessidade de avanços tecnológicos e de políticas públicas que viabilizem sua aplicação em larga escala.<sup>2,5</sup>

## Conclusões

A análise crítica do artigo, associada a estudos mais recentes da literatura nacional, demonstra que o aproveitamento energético do biogás em Estações de



Tratamento de Esgoto representa uma estratégia tecnicamente viável e ambientalmente vantajosa. Embora a geração de energia raramente seja suficiente para suprir integralmente a demanda das ETES, a autossuficiência parcial alcançada contribui para a redução de custos operacionais e da dependência de fontes externas de energia.

Além disso, a recuperação do biogás promove benefícios ambientais relevantes, sobretudo pela mitigação das emissões de gases de efeito estufa. Contudo, para maximizar esses benefícios, é fundamental investir em melhorias operacionais, sistemas de vedação adequados, monitoramento contínuo do biogás e políticas públicas que incentivem a geração distribuída de energia no setor de saneamento.

Conclui-se que a integração entre saneamento básico e geração de energia renovável é um caminho promissor para o desenvolvimento sustentável no Brasil, sendo o aproveitamento energético do biogás uma solução estratégica que merece maior atenção no planejamento e na gestão das ETES.

## Contribuições por Autor

A resenha sobre o artigo em referência e a inclusão de detalhes obtidos por artigos auxiliares são de Julia Ribeiro Dias.

## Conflito de interesse

Não há conflito de interesses.

## Agradecimentos

Ao Grupo PET-Química/IQ/UnB, à Secretaria de Educação Superior do Ministério da Educação (SeSU/MEC) e ao Decanato de Ensino de Graduação (DEG/UnB) pelo apoio ao Programa de Educação Tutorial pela bolsa concedida. Ao Instituto de Química (IQ/UnB) e à Universidade de Brasília pelo suporte e espaço fornecidos.

## Notas e referências

1. Empresa De Pesquisa Energética (EPE). *Anuário Estatístico de Energia Elétrica 2024*. Rio de Janeiro: EPE, 2024. Acesso em: 10 jan. 2026.
2. P. Bilotta and B. Z. L. Ross, Estimativa de geração de energia e emissão evitada de gás de efeito estufa na

recuperação de biogás produzido em estação de tratamento de esgotos, *Eng. Sanit. Ambient.*, 2016, 21, 275–282.

3. EMBRAPA. *Produção de biogás a partir de resíduos agroindustriais*. Documentos 49. Brasília, DF: Embrapa, 2023. Acesso em: 10 jan. 2026.
4. Chernicharo, C. A. L. *Reatores anaeróbios*. Engenharia Sanitária e Ambiental, Rio de Janeiro, v. 12, n. 3, p. 263–266, 2007.
5. Azevedo, L. M.; Costa, R. S.; Oliveira, T. A. *Geração de energia a partir de estação de tratamento de Esgoto como prática de desenvolvimento sustentável*. Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental, 33., 2025.
6. Savi, Vitor Gonçalves. *Avaliação do potencial de geração de energia elétrica a partir de biogás produzido na estação de tratamento de esgoto (ETE) Santa Luzia (Criciúma/SC)*. 2019.
7. Cancelli, T. *Geração de energia a partir do biogás de estações de Tratamento de esgoto doméstico*.

# Cálculo de energia eletrônica molecular via *Variational Quantum Eigensolver* (VQE)

DOI:

Hellen Ferreira da Silva<sup>a\*</sup>

The Variational Quantum Eigensolver (VQE) is a hybrid quantum–classical algorithm proposed for estimating electronic energies on noisy intermediate-scale quantum devices. In this work, a theoretical discussion of the VQE applied to chemistry is presented, covering its variational formulation, the second-quantized representation of the electronic Hamiltonian, the mapping to qubits, and the use of ansätze inspired by electronic structure methods. The aim is to contextualize the VQE within modern quantum chemistry and discuss its potential and limitations.

O *Variational Quantum Eigensolver* (VQE) é um algoritmo híbrido quântico-clássico proposto para o cálculo de energias eletrônicas em dispositivos quânticos ruidosos de curto prazo. Neste trabalho, apresenta-se uma discussão teórica do VQE aplicado à química, abordando sua formulação variacional, a representação do Hamiltoniano eletrônico em segunda quantização, o mapeamento para *qubits* e o uso de *ansatz* inspirados em métodos de estrutura eletrônica. O objetivo é contextualizar o VQE no panorama atual da química quântica e discutir suas potencialidades e limitações.

<sup>a</sup>Universidade de Brasília (UnB). Campus Darcy Ribeiro. Instituto de Química (IQ/UnB).

\*E-mail: hellenferreiradf@gmail.com

**Palavras-chave:** VQE; computação quântica; *qubits*; *ansatz*; NISQ.

Recebido em 11 de janeiro de 2026,

Aprovado em 28 de janeiro de 2026,

Publicado em 03 de fevereiro de 2026.

## Introdução

A determinação precisa da energia eletrônica de moléculas é um dos problemas centrais da química quântica.<sup>1</sup> Métodos clássicos baseados na mecânica quântica permitem descrever essas propriedades, mas rapidamente se tornam computacionalmente custosos à medida que o tamanho do sistema cresce.<sup>2</sup> Nesse contexto, a computação quântica surge como uma alternativa promissora. Entre os algoritmos propostos para aplicações no curto prazo, o *Variational Quantum Eigensolver* (VQE) destaca-se por ser um método híbrido quântico-clássico adequado às limitações atuais do hardware quântico.<sup>1</sup>

A mecânica quântica constitui um dos pilares fundamentais da ciência moderna. Desde o estabelecimento de seus fundamentos teóricos nas primeiras décadas do século XX, com contribuições decisivas de Planck, Einstein, Bohr, Schrödinger, Heisenberg e Dirac, essa teoria revolucionou a compreensão da matéria em escala microscópica.<sup>3</sup> O período de 1925–1926, marcado pela formulação da mecânica matricial e da equação de Schrödinger, é frequentemente considerado o nascimento formal da mecânica quântica. Assim, o ano de 2025 representa simbolicamente o centenário dessa teoria, cujo impacto científico e tecnológico permanece profundo e crescente.<sup>4</sup>

Na química, a mecânica quântica forneceu a base conceitual para a descrição microscópica da estrutura da matéria. A partir dela, tornou-se possível compreender a natureza das ligações químicas, interpretar espectros moleculares, descrever superfícies de energia potencial e prever propriedades termodinâmicas e cinéticas de sistemas moleculares. A química quântica, enquanto área consolidada, tem como objetivo central resolver, ainda que aproximadamente, a equação de Schrödinger associada a sistemas de muitos elétrons, permitindo a obtenção de propriedades químicas a partir de primeiros princípios (*ab initio*).<sup>1</sup>

O ponto de partida formal desses estudos é a equação de Schrödinger independente do tempo,

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (1)$$

em que  $\hat{H}$  é o operador Hamiltoniano do sistema,  $\Psi$  é a função de onda eletrônica e  $E$  representa a energia associada ao estado considerado. Apesar de sua forma compacta, a solução dessa equação para sistemas moleculares reais é desafiadora. A presença do termo de repulsão elétron–elétron

acopla o movimento de todas as partículas fazendo com que a dimensão do espaço de Hilbert, cresça exponencialmente com o número de elétrons e orbitais considerados.<sup>1</sup>

Ao longo das últimas décadas, diversos métodos computacionais clássicos foram desenvolvidos para contornar esse problema, incluindo o método de Hartree–Fock, a teoria do funcional da densidade (DFT) e métodos pós-Hartree–Fock, como interação de configurações (CI), teoria de perturbação de Møller–Plesset (MP2) e Coupled Cluster. Embora esses métodos tenham alcançado grande sucesso, apresentam limitações importantes. Destacam-se, em especial, as dificuldades no tratamento de sistemas fortemente correlacionados e na obtenção simultânea de alta precisão e escalabilidade computacional.<sup>5</sup>

Nesse contexto, a computação quântica surge como uma possível alternativa para o problema da estrutura eletrônica. A ideia de utilizar sistemas quânticos controláveis para simular outros sistemas quânticos foi idealizada de forma pioneira por Feynman, que observou que a simulação eficiente de sistemas quânticos é, em geral, inviável em computadores clássicos. Em princípio, computadores quânticos podem representar estados quânticos complexos de forma exponencialmente mais eficiente, explorando superposição e emaranhamento.

Os dispositivos quânticos atualmente disponíveis, no entanto, ainda são limitados em número de *qubits*, profundidade de circuitos e fidelidade das operações. Esses dispositivos são conhecidos como computadores NISQ (*Noisy Intermediate-Scale Quantum*). Nesse regime, algoritmos quânticos tradicionais tornam-se impraticáveis, devido aos erros causados por ruído e interferência. Como alternativa, algoritmos variacionais híbridos foram propostos, combinando medições em hardware quântico com rotinas de otimização clássicas.<sup>1</sup>

Entre esses algoritmos, o *Variational Quantum Eigensolver* (VQE) destaca-se como uma das abordagens mais promissoras para aplicações em química quântica no curto e médio prazo. Baseado no princípio variacional da mecânica quântica, o VQE permite estimar a energia do estado fundamental de Hamiltonianos moleculares utilizando circuitos quânticos relativamente rasos, tornando-o mais compatível com as limitações dos dispositivos atuais, já que utilizando os dispositivos quânticos em somente uma parte do cálculo, os erros são mitigados.<sup>6</sup>

## Metodologia

Para o desenvolvimento deste artigo, realizou-se uma busca bibliográfica específica nos periódicos Google Acadêmico, Periódicos CAPES, PubMed, SciELO, Wiley Online Library e ACS Publications acessadas por meio do acesso gratuito concedido a estudantes da Universidade de Brasília (UnB) pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), através da Comunidade Acadêmica Federada (CAFe). Utilizaram-se as palavras-chave “Computação Quântica”, “Química”, “Química Quântica”, “VQE” e “NISQ”. Por se tratar de uma área em ascensão, com grandes evoluções em curtos períodos de tempo, foram considerados, para as aplicações, artigos publicados entre 2024 e 2026, a fim de obter as informações mais recentes sobre o tema.

## Resultados e discussão

No âmbito da química quântica, a determinação da energia eletrônica de uma molécula constitui um problema central, pois dela derivam propriedades estruturais, espectroscópicas e reativas. Partindo da equação de Schrödinger para um sistema molecular composto por núcleos e elétrons, é comum empregar a aproximação de Born–Oppenheimer, na qual se explora a diferença de massas entre núcleos e elétrons para separar os movimentos nuclear e eletrônico.<sup>1</sup>

Sob essa aproximação, as posições nucleares são consideradas fixas, e o problema reduz-se à resolução da equação de Schrödinger eletrônica,

$$\hat{H}_e \Psi_e(r_1, \dots, r_{N_e}) = E_e \Psi_e(r_1, \dots, r_{N_e}) \quad (2)$$

em que  $N_e$  é o número de elétrons e  $\hat{H}$  é o Hamiltoniano eletrônico, dado por

$$\hat{H}_e = - \sum_{i=1}^{N_e} \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{A=1}^{N_n} \frac{Z_A}{|r_i - R_A|} + \sum_{i < j}^{N_e} \frac{1}{|r_i - r_j|} + V_{NN} \quad (3)$$

Aqui,  $Z_A$  e  $R_A$  representam, respectivamente, a carga e a posição do núcleo A, enquanto  $V_{NN}$  corresponde à

repulsão núcleo-núcleo, que é constante devido a aproximação Born-Oppenheimer.<sup>1</sup>

O principal desafio desse problema reside no termo de repulsão elétron-elétron, que introduz correlação entre todos os elétrons do sistema.<sup>7</sup> Como consequência, a função de onda eletrônica depende simultaneamente das coordenadas de todos os elétrons, e a dimensão do espaço de Hilbert cresce exponencialmente com o número de orbitais considerados. Esse crescimento exponencial torna inviável a obtenção de soluções exatas para sistemas moleculares de tamanho moderado ou grande em computadores clássicos.<sup>8</sup>

Métodos aproximados clássicos, como Hartree-Fock, tratam a correlação eletrônica de forma média, enquanto métodos pós-Hartree-Fock incorporam correções sistemáticas ao custo de maior esforço computacional.<sup>9</sup> Ainda assim, a escalabilidade desses métodos permanece um obstáculo fundamental, motivando a busca por novas abordagens computacionais.

### Computação quântica

A computação quântica baseia-se nos princípios da mecânica quântica para o processamento de informação. A unidade fundamental de informação é o *qubit*, que pode ser descrito como uma superposição linear de dois estados base,

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (4)$$

Com  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ , sistemas de múltiplos *qubits* podem exibir emaranhamento, permitindo correlações quânticas que não possuem análogo clássico.<sup>10</sup>

A relevância da computação quântica para a química foi reconhecida desde os trabalhos pioneiros de Feynman, que observou que a simulação eficiente de sistemas quânticos é, em geral, inviável em computadores clássicos. Em princípio, um computador quântico pode representar estados quânticos complexos de forma natural, evitando a explosão exponencial de recursos observada em simulações clássicas.<sup>1</sup>

Entretanto, os dispositivos quânticos atualmente disponíveis pertencem à chamada era NISQ (*Noisy Intermediate-Scale Quantum*), caracterizada por um número

limitado de *qubits* e pela presença significativa de ruído.<sup>11</sup> Nesse regime, algoritmos quânticos profundos e tolerantes a falhas ainda não são realizáveis experimentalmente, o que motivou o desenvolvimento de algoritmos híbridos quântico-clássicos.

### Formulação teórica do VQE

O *Variational Quantum Eigensolver (VQE)* é um algoritmo híbrido que explora o princípio variacional da mecânica quântica. De acordo com esse princípio, para qualquer estado quântico normalizado  $|\psi(\theta)\rangle$ , o valor esperado da energia satisfaz a desigualdade

$$E\langle\psi(\theta)|\hat{H}|\psi(\theta)\rangle = E(\theta) \geq E_0 \quad (5)$$

onde  $E_0$  é a energia exata do estado fundamental do Hamiltoniano.<sup>1</sup>

No VQE, escolhe-se uma família parametrizada de estados quânticos, denominada *ansatz*, que depende de um conjunto de parâmetros reais  $\theta$ . O problema da estrutura eletrônica é então reformulado como um problema de otimização variacional

$$E_0 \approx \min_{\theta} \langle\psi(\theta)\rangle \quad (6)$$

A avaliação do valor esperado da energia é realizada em um computador quântico, enquanto a minimização em relação aos parâmetros  $\theta$  é conduzida por um algoritmo clássico. Esse ciclo quântico-clássico é repetido iterativamente até a convergência da energia.<sup>1,2,6</sup>

Para sistemas moleculares, o Hamiltoniano eletrônico é expresso em segunda quantização,

$$\hat{H} = \sum_{pq} h_{pq} a_p^\dagger a_q + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} h_{pqrs} a_p^\dagger a_q^\dagger a_s a_r + h_0 \quad (7)$$



em que  $a_p^\dagger$  e  $a_p$  são operadores de criação e aniquilação fermiônicos, e os coeficientes  $h_{pq}$  e  $h_{pqrs}$  correspondem às integrais eletrônicas sobre a base escolhida.<sup>1</sup>

Esses operadores são então mapeados para operadores que atuam sobre *qubits* por meio de transformações como Jordan–Wigner ou Bravyi–Kitaev, resultando em um Hamiltoniano da forma

$$\hat{H} = \sum_k c_k \hat{P}_k \quad (8)$$

em que  $\hat{P}_k$  são produtos de matrizes de Pauli. Cada termo pode ser medido separadamente no computador quântico, permitindo a reconstrução do valor esperado da energia total.

Para a aplicação do VQE a sistemas moleculares, o Hamiltoniano eletrônico, formulado em segunda quantização, deve ser convertido em uma forma compatível com a implementação em hardware quântico. O Hamiltoniano geral é escrito como

$$\hat{H} = \sum_{pq} h_{pq} a_p^\dagger a_q + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} h_{pqrs} a_p^\dagger a_q^\dagger a_s a_r + h_0 \quad (7)$$

onde os índices p, q, r, s referem-se a spin-orbitais, e os coeficientes  $h_{pq}$  e  $h_{pqrs}$  são obtidos a partir de integrais de um e dois elétrons sobre uma base finita.<sup>1,2,6</sup>

Os operadores fermiônicos  $a_p^\dagger$  e  $a_p$  obedecem às relações de anticomutação,

$$\{a_p, a_q^\dagger\} = \delta_{pq}, \{a_p, a_q\} = 0 \quad (9)$$

o que exige um mapeamento adequado para operadores que atuem sobre *qubits*. Entre os esquemas mais utilizados estão as transformações de Jordan–Wigner e Bravyi–Kitaev.<sup>1</sup>

No mapeamento de Jordan–Wigner, cada operador fermiônico é associado a uma cadeia de operadores de Pauli,

$$a_p^\dagger = \left( \prod_{j < p} \hat{Z}_j \right) \frac{\hat{X}_p - i\hat{Y}_p}{2}, a_p = \left( \prod_{j < p} \hat{Z}_j \right) \frac{\hat{X}_p + i\hat{Y}_p}{2} \quad (10)$$

Após o mapeamento, o Hamiltoniano assume a forma

$$\hat{H} = \sum_k c_k \hat{P}_k \quad (8)$$

em que  $\hat{P}_k$  são produtos tensoriais de matrizes de Pauli  $\{I, X, Y, Z\}$  e  $c_k$  são coeficientes reais. Essa decomposição permite que o valor esperado da energia seja obtido como a soma dos valores esperados de cada termo individual.<sup>1</sup>

A escolha do *ansatz* é um dos aspectos mais críticos do VQE, pois determina a qualidade da aproximação ao estado fundamental e a complexidade do circuito quântico. Em aplicações químicas, um dos *ansätze* mais estudados é o *Unitary Coupled Cluster* (UCC), que estabelece uma conexão direta com métodos clássicos de estrutura eletrônica.<sup>12,15</sup>

No formalismo UCC, o estado variacional é construído a partir do estado de Hartree–Fock  $|\psi_{HF}\rangle$  como

$$|\psi(\theta)\rangle = e^{\hat{T}(\theta) - \hat{T}^\dagger(\theta)} |\psi_{HF}\rangle \quad (11)$$

onde  $\hat{T}$  é o operador de excitação, definido como

$$\hat{T} = \sum_{i,a} \theta_i^a a_a^\dagger a_i + \sum_{i < j, a < b} \theta_{ij}^{ab} a_a^\dagger a_b^\dagger a_j a_i + \dots \quad (12)$$

Aqui, os índices i, j referem-se a orbitais ocupados, enquanto a, b correspondem a orbitais virtuais. Na prática, o operador é truncado em excitações simples e duplas, originando o *ansatz* UCCSD.<sup>3,12</sup>

A natureza unitária do operador exponencial garante a preservação da normalização da função de onda, mas introduz desafios computacionais, pois a implementação direta da exponencial requer a decomposição em circuitos quânticos por meio de fórmulas como a expansão de Trotter–Suzuki. O número de termos cresce rapidamente com o tamanho do sistema, impondo limitações práticas em dispositivos NISQ.<sup>11</sup>

A otimização dos parâmetros  $\theta$  é realizada classicamente, com base nas energias medidas no computador quântico. Diversos algoritmos de otimização podem ser empregados, incluindo métodos baseados em gradiente, métodos sem derivadas e algoritmos estocásticos.<sup>1,2</sup>

Um desafio importante do VQE está associado à paisagem de otimização, que pode apresentar regiões planas conhecidas como *barren plateaus*, nas quais o gradiente da função custo se torna exponencialmente pequeno com o número de *qubits*.<sup>2</sup> Além disso, o ruído experimental afeta diretamente a precisão das medições, aumentando a variância estatística e dificultando a convergência do algoritmo.<sup>1</sup>

Outro aspecto crítico é o custo de medições. Como o Hamiltoniano é decomposto em um grande número de termos de Pauli, a estimativa precisa da energia total pode exigir um número elevado de execuções do circuito quântico, o que impacta a viabilidade prática do método.<sup>1</sup>

Apesar dessas limitações, o VQE permanece como uma das abordagens mais promissoras para a química quântica em dispositivos NISQ, servindo também como plataforma para o desenvolvimento de técnicas de mitigação de erros e novos *ansatz* variacionais.

## Conclusões

O *Variational Quantum Eigensolver* representa um marco importante na interface entre química quântica e computação quântica. Fundamentado no princípio variacional da mecânica quântica, o VQE permite reformular o problema da estrutura eletrônica como uma tarefa de otimização híbrida quântico-clássica, compatível com as limitações do hardware quântico atual.

Embora ainda não exista uma demonstração clara de vantagem quântica para sistemas quimicamente relevantes, os avanços recentes em *ansatz*, estratégias de otimização e mitigação de erros indicam um caminho promissor para aplicações futuras. No contexto do centenário da mecânica quântica, o desenvolvimento de algoritmos como o VQE ilustra como conceitos formulados há um século continuam a inspirar novas abordagens para problemas fundamentais da química.

À medida que dispositivos quânticos mais robustos e escaláveis se tornem disponíveis, espera-se que o VQE e seus sucessores desempenhem um papel crescente na modelagem de sistemas moleculares complexos, ampliando as fronteiras da química computacional.

## Contribuições por Autor

A resenha sobre o artigo em referência e a inclusão de observações são de Hellen Ferreira da Silva.

## Conflito de interesse

Não há conflito de interesses.

## Agradecimentos

Ao grupo PET-Química/IQ/UnB, à Secretaria de Educação Superior do Ministério da Educação (SeSU/MEC) e ao Decanato de Ensino de Graduação (DEG/UnB) pelo apoio ao Programa de Educação Tutorial pela bolsa concedida. Ao Instituto de Química (IQ/UnB) e à Universidade de Brasília pelo suporte e espaço fornecidos.

## Referências

- 1 A. Peruzzo, J. McClean, J. L. O'Brien, A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor, *Nature Communications*, **5**, 2014.
- 2 J. R. McClean, J. Romero, R. Babbush, A. Aspuru-Guzik, The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms, *New Journal of Physics*, **18**, 2016.
- 3 Y. Cao, J. Romero, A. Aspuru-Guzik, Quantum chemistry in the age of quantum computing, *Chemical Reviews*, **119**, 2019.
- 4 R. Babbush, J. R. McClean, D. Wecker, A. Aspuru-Guzik, N. Wiebe, Chemical basis of

- Trotter–Suzuki errors in quantum chemistry simulation, *Physical Review A*, **91**, 2015.
- 5 P. J. J. O’Malley et al., Scalable quantum simulation of molecular energies, *Physical Review*, **6**, 2016.
  - 6 J. I. Colless et al., Computation of molecular spectra on a quantum processor with an error-resilient algorithm, *Physical Review*, **8**, 2018.
  - 7 N. Moll, P. Barkoutsos, M. Ganzhorn, et al., Quantum optimization using variational algorithms on near-term quantum devices, *Quantum Science and Technology*, **3**, 2018.
  - 8 J. Preskill, Quantum computing in the NISQ era and beyond, *Quantum*, **2**, 2018.
  - 9 J. Romero, R. Babbush, A. Aspuru-Guzik, Strategies for quantum computing molecular energies using the unitary coupled cluster ansatz, *Quantum Science and Technology*, **4**, 2019.
  - 10 S. McArdle, S. Endo, A. Aspuru-Guzik, S. C. Benjamin, X. Yuan, Quantum computational chemistry, *Reviews of Modern Physics*, **92**, 2020.
  - 11 A. Kandala et al., Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets, *Nature*, **549**, 2017.
  - 12 T. Helgaker, P. Jørgensen, J. Olsen, Molecular Electronic-Structure Theory, Wiley, Chichester, 2000.
  - 13 I. M. Georgescu, S. Ashhab, F. Nori, Quantum simulation, *Reviews of Modern Physics*, **86**, 2014.
  - 14 R. Szabo, N. S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, *Dover Publications*, 1996.
  - 15 D. A. Mazziotti, Quantum chemistry: a physical chemistry perspective, *Chemical Reviews*, **112**, 2012.

# Cannabis medicinal no Brasil: avanços regulatórios, desafios produtivos e soberania tecnológica

DOI: 10.5281/zenodo.18462436

Gabriel Castro e Silva<sup>a\*</sup>

*Cannabis sativa* L. exhibits high chemical complexity, notably characterized by the biosynthesis of phytocannabinoids such as cannabidiol (CBD) and  $\Delta^9$ -tetrahydrocannabinol (THC), whose structural differences underpin distinct pharmacological profiles. This article aims to update the regulatory, pharmaceutical, and industrial landscape of medicinal Cannabis in Brazil, based on the period from 2020 to 2024 and incorporating data and regulatory developments from 2025 and 2026. The methodology consisted of documentary analysis and qualitative exploratory research, focusing on ANVISA resolutions, public institutional databases, and specialized scientific literature. The results highlight the gradual expansion in the number of companies and products holding Sanitary Authorization, the persistent geographic concentration in the Southeast region, and the continued dependence on imported active pharmaceutical ingredients. Nevertheless, a relevant regulatory advancement is observed, indicating market maturation and strengthening of the national productive chain.

e o  $\Delta^9$ -tetrahydrocannabinol (THC), cujas diferenças estruturais fundamentam perfis farmacológicos distintos. Este artigo tem como objetivo atualizar o panorama regulatório, farmacêutico e industrial da *Cannabis* medicinal no Brasil, tomando como base o período de 2020 a 2024 e incorporando dados e normativas referentes aos anos de 2025 e 2026. A metodologia adotada consistiu em análise documental e pesquisa qualitativa exploratória, com foco em resoluções da ANVISA, bases públicas institucionais e literatura científica especializada. Os resultados evidenciam a ampliação gradual do número de empresas e produtos com Autorização Sanitária, a persistente concentração geográfica na região Sudeste e a manutenção da dependência de insumos importados. Observa-se, contudo, um avanço regulatório relevante, com sinais de maturação do mercado e fortalecimento da cadeia produtiva nacional.

<sup>a</sup>Universidade de Brasília (UnB). Campus Darcy Ribeiro. Instituto de Química (IQ/UnB).

\*E-mail: Gabriel.cs018@gmail.com

**Palavras-chave:** Cannabis medicinal; insumo farmacêutico ativo (IFA); regulação sanitária; soberania tecnológica.

Recebido em 12 de janeiro de 2026,

Aprovado em 25 de janeiro de 2026,

Publicado em 03 de fevereiro de 2026.

A *Cannabis sativa* L. apresenta elevada complexidade química, destacando-se pela biossíntese de fitocanabinoides como o canabidiol (CBD)

## Introdução

O termo *Cannabis sativa* L. refere-se ao gênero botânico que engloba diferentes espécies da planta *Cannabis*, cujo uso por sociedades humanas encontra-se documentado há pelo menos dois milênios.<sup>1</sup> Registros históricos indicam que a interação entre o ser humano e a *Cannabis* teve início em contextos majoritariamente industriais, medicinais e rituais, com destaque para civilizações antigas da Ásia, como a China e a Índia. Nessas culturas, a planta foi amplamente utilizada tanto na produção de fibras e óleos quanto em práticas terapêuticas e religiosas, evidenciando sua relevância econômica, cultural e social ao longo da história.<sup>2</sup> A morfologia geral da planta *Cannabis* está ilustrada na Figura 1.

**Figura 1.** Planta *Cannabis*. Extraída da Referência 11.



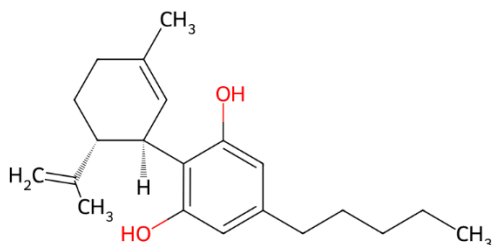
Do ponto de vista químico, a *Cannabis* distingue-se por uma biossíntese altamente especializada, capaz de originar mais de uma centena de fitocanabinoides.<sup>3</sup> Esses metabólitos secundários apresentam elevada afinidade por alvos biológicos em mamíferos, especialmente componentes



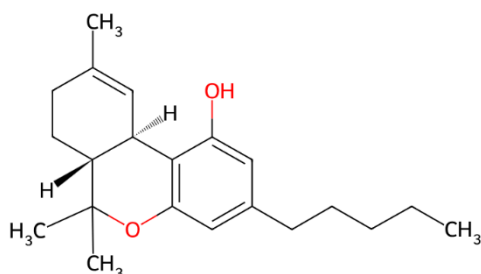
do sistema endocanabinoide (SEC), o que fundamenta o crescente interesse científico e farmacológico pela planta.<sup>4</sup> Além dos fitocanabinoides, a complexidade química da *Cannabis* inclui terpenos e flavonoides, os quais podem contribuir para seus efeitos biológicos e terapêuticos, reforçando o potencial multifacetado desse gênero vegetal.<sup>3,5</sup>

Entre os fitocanabinoides, destacam-se o canabidiol (CBD) e o  $\Delta^9$ -tetrahydrocannabinol (THC), considerados os principais responsáveis pelos efeitos biológicos e terapêuticos da planta. Embora compartilhem a mesma fórmula molecular ( $C_{21}H_{30}O_2$ ) e massa molar (314,46 g/mol), o CBD e o THC são isômeros estruturais, ou seja, possuem os mesmos átomos organizados de maneiras distintas no espaço.<sup>1</sup> A principal diferença estrutural reside na conformação de seus anéis: enquanto o THC apresenta uma estrutura fechada e mais rígida, o CBD possui uma conformação aberta e flexível.<sup>3</sup> Essa diferença geométrica influencia diretamente a forma como cada molécula interage com alvos biológicos, explicando por que o THC está associado a efeitos psicotrópicos, ao passo que o CBD não apresenta esse perfil.<sup>1,4</sup> As estruturas químicas do CBD e do THC estão representadas nas Figuras 2 e 3, respectivamente.

**Figura 2.** Estrutura química do Canabidiol (CBD). Extraída pelo autor do *software ChemSpider*.

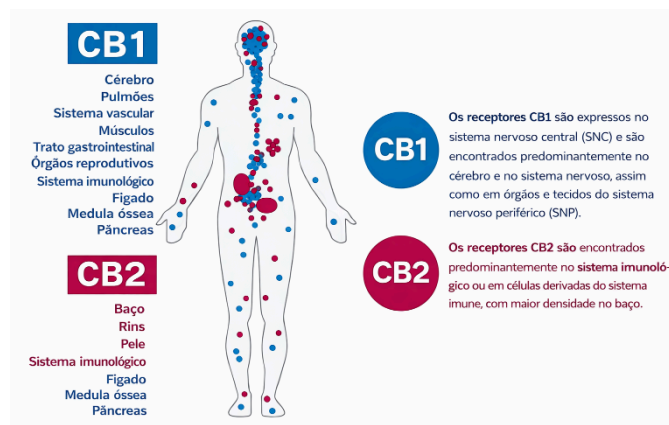


**Figura 3.** Estrutura química do  $\Delta^9$ -tetrahydrocannabinol (THC). Extraída pelo autor do *software ChemSpider*.



A compreensão dos efeitos desses compostos ocorre a partir do estudo do Sistema Endocanabinoide (SEC), um conjunto de mecanismos bioquímicos responsáveis pela regulação do equilíbrio de diversas funções fisiológicas, como dor, sono, apetite e atividade neural. O SEC é composto principalmente por receptores celulares, denominados CB<sub>1</sub> e CB<sub>2</sub>, por ligantes endógenos, como a anandamida, e por enzimas que controlam sua síntese e degradação.<sup>4,6</sup> Os principais receptores do SEC estão representados na Figura 4.

**Figura 4.** Sistema endocanabinoide (SEC). Adaptado da referência 7.



Nesse contexto, o THC atua de maneira semelhante aos endocanabinoides naturais do organismo, ligando-se diretamente aos receptores canabinoides, especialmente ao receptor CB<sub>1</sub> amplamente distribuído no sistema nervoso central, o que explica seus efeitos psicotrópicos. Em contraste, o CBD apresenta um mecanismo de ação distinto, não se ligando diretamente aos receptores da mesma forma, mas atuando como modulador do sistema endocanabinoide, o que contribui para a ausência de efeitos psicoativos típicos.<sup>4</sup>

A partir desses mecanismos, a cannabis medicinal tem demonstrado relevância na medicina moderna, com aplicações bem estabelecidas no controle de crises convulsivas graves, como na epilepsia refratária, no alívio de sintomas da esclerose múltipla e na melhora de funções motoras em pacientes com doença de Parkinson. No contexto das epilepsias graves, como as síndromes de Dravet e Lennox-Gastaut, o CBD destaca-se por sua capacidade de estabilizar a excitabilidade neuronal, interagindo com canais iônicos e receptores específicos, o que resulta na redução significativa da frequência de crises.<sup>4,6</sup>

No cenário brasileiro, o acesso a terapias à base de cannabis foi progressivamente institucionalizado pela Agência Nacional de Vigilância Sanitária (ANVISA) por meio de marcos regulatórios que buscaram conciliar a ampliação do acesso com o controle sanitário. A RDC nº 327/2019 representou um avanço decisivo ao criar a categoria regulatória específica denominada “Produtos de *Cannabis*”, estabelecendo critérios técnicos para autorização sanitária, prescrição médica, dispensação em farmácias e monitoramento pós-comercialização. Essa norma não equipara tais produtos a medicamentos convencionais, mas impõe exigências rigorosas relacionadas à qualidade farmacêutica, à padronização de teores de canabinoides, à rastreabilidade e às boas práticas de fabricação, garantindo maior segurança ao paciente.<sup>8</sup>

Complementarmente, a RDC nº 660/2022 regulamentou a importação excepcional de produtos derivados de cannabis para uso pessoal mediante prescrição médica, simplificando procedimentos administrativos e ampliando o acesso para pacientes com condições crônicas ou refratárias. Essa resolução atendeu a uma demanda crescente de famílias e profissionais de saúde, ao permitir o acesso legal a formulações ainda indisponíveis no mercado nacional, mantendo, contudo, mecanismos de controle sanitário e documental por parte da ANVISA.<sup>9</sup>

A consolidação deste arcabouço normativo permitiu o mapeamento sistemático do setor, como demonstrado no estudo de Ferreira e Lombardo, que estabeleceu um panorama farmacêutico e sanitário dos produtos de Cannabis no Brasil entre 2020 e 2024.<sup>10</sup> Esse levantamento histórico evidenciou uma fase de estruturação do mercado, caracterizada pela dependência de insumos importados e pelo estabelecimento das primeiras empresas detentoras de Autorização Sanitária (AS) no país. Entretanto, o cenário observado a partir de 2025 sinaliza uma transição para uma nova fase de maturação, marcada por um crescimento acelerado no número de empresas autorizadas e pelo surgimento de iniciativas voltadas à soberania tecnológica na produção de insumos.

Diante dessa rápida evolução, torna-se fundamental atualizar os indicadores que regem o setor para compreender as tendências do biênio 2025-2026. O presente trabalho busca discutir a expansão do mercado em 2025, avaliar os impactos da introdução de insumos farmacêuticos nacionais e projetar os desafios regulatórios para o ano de 2026.

## Metodologia

A presente investigação caracteriza-se como uma pesquisa qualitativa, de natureza exploratória, fundamentada em procedimentos de análise documental. O percurso metodológico foi estruturado em duas etapas complementares, com o objetivo de articular a literatura científica consolidada com as atualizações regulatórias e tendências recentes do setor de *cannabis* medicinal no Brasil.

Na primeira etapa, adotou-se como principal referencial bibliográfico o estudo de Ferreira e Lombardo, que forneceu a base histórica e técnica sobre o panorama farmacêutico e sanitário da cannabis medicinal no período de 2020 a 2024.<sup>10</sup> A metodologia empregada nesse trabalho incluiu revisões sistemáticas em bases de dados científicas e auditorias no portal da ANVISA, permitindo a delimitação de um recorte temporal consistente quanto à evolução dos produtos autorizados e das Resoluções da Diretoria Colegiada (RDCs) aplicáveis ao tema.

Na segunda etapa, desenvolveu-se uma investigação prospectiva e autoral voltada à atualização do cenário para o biênio 2025–2026. A estratégia de busca fundamentou-se no cruzamento dos descritores “*Cannabis* medicinal”, “Insumo Farmacêutico Ativo (IFA)”, “regulação sanitária” e “soberania tecnológica”, empregados em portais governamentais da ANVISA e do Ministério da Saúde, além de bases de veículos especializados. Os critérios de inclusão compreenderam documentos normativos oficiais (RDCs e Consultas Públicas), relatórios setoriais institucionais e notas técnicas publicados entre janeiro de 2025 e janeiro de 2026 que abordassem diretamente a produção nacional ou atualizações regulatórias. A triangulação dessas fontes possibilitou uma visão integrada e atualizada dos desafios e perspectivas da *Cannabis* medicinal no contexto brasileiro contemporâneo.

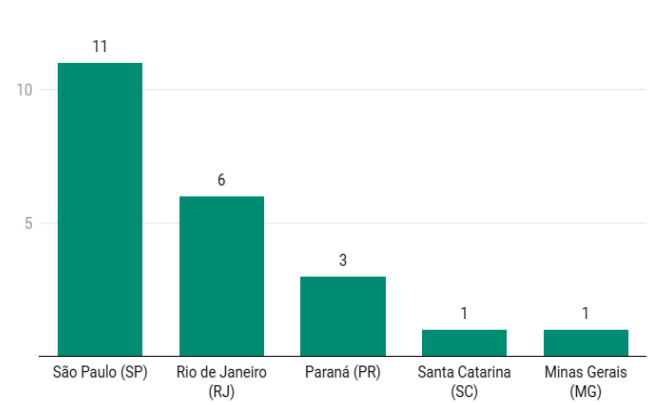
## Resultados e discussão

Para estabelecer uma base comparativa sólida, os resultados iniciais desta análise fundamentam-se no levantamento histórico realizado por Ferreira e Lombardo, que mapeou o cenário regulatório e farmacêutico brasileiro entre os anos de 2020 e 2024.<sup>10</sup>

De acordo com o levantamento realizado, o período entre 2020 e 2024 consolidou a fase inicial de estruturação regulatória e de oferta de produtos de Cannabis para fins medicinais no Brasil. Ao final de 2024, o setor reunia 19

empresas detentoras de AS concedida nos termos da RDC nº 327/2019, evidenciando um processo de crescimento gradual e ainda restrito a um número limitado de agentes econômicos.<sup>10</sup> Com a transição para 2025, observou-se uma expansão moderada da estrutura regulada, com o contingente de empresas autorizadas aumentando para 21, enquanto o número de produtos com AS válida alcançou 33 registros ao final do período analisado.<sup>12</sup>

**Figura 5.** Estados de cada empresa com Autorização Sanitária (AS) válida para produtos. Feito pelo autor a partir de dados da referência 12.



**Tabela 1.** Empresas, localidade e números de produtos com Autorização Sanitária (AS) válida para produtos de *Cannabis* no Brasil. Feita pelo autor a partir dos dados da referência 12.

Empresas	Estado	Produtos
ACHÉ Laboratórios Farmacêuticos S.A.	SP	1
Cannten Ltda.	SP	1
Collect Importação e Comércio Ltda	SP	1
Cosmed Indústria de Cosméticos e Medicamentos S.A.	SP	1
Endogen Indústria, Comércio, Importação, Exportação e Serviços Ltda	SP	1
Eurofarma Laboratórios S.A.	SP	4
FarmaUSA Life Science Ltda	SP	1
Fundação para o Remédio Popular – FURP	SP	1
Greencare Pharma Comércio Atacadista de Medicamentos e Cosméticos Ltda	SP	1
Promediol do Brasil Ltda	SP	1
Verdemed Farmacêutica Ltda	SP	4
FarmaUSA Life Science Ltda	RJ	3
FarmaUSA Pharmaceutical Ltda	RJ	1
Fundação Oswaldo Cruz (Farmanguinhos)	RJ	1
Makrofarma Química Farmacêutica Ltda	RJ	1
Nunature Distribuição do Brasil Ltda	RJ	2
Sanusphar Pesquisa e Desenvolvimento Ltda	RJ	1

Empresas	Estado	Produtos
Aura Pharma S.A.	PR	1
Herbarium Laboratório Botânico Ltda	PR	1
Prati Donaduzzi & Cia Ltda	PR	2
Easelabs Laboratório Farmacêutico Ltda.	MG	1
Active Pharmaceutica Ltda ME	SC	1

Como visto na Tabela 1 e na Figura 5, a análise conjunta desses dados revela a manutenção de uma forte concentração geográfica na região Sudeste, especialmente no estado de São Paulo, além da predominância de formulações baseadas em extratos vegetais complexos, em detrimento do uso de canabinoides isolados.<sup>12</sup>

Apesar do avanço regulatório, o mercado manteve-se fortemente dependente da importação de Insumos Farmacêuticos Ativos (IFA), fator que contribuiu para custos elevados, menor competitividade e restrições ao acesso terapêutico. Ao avançar para o ano de 2025, o cenário regulatório brasileiro evidencia a consolidação do acesso terapêutico a produtos à base de *Cannabis*, especialmente por meio da importação excepcional regulamentada pela RDC nº 660/2022. Paralelamente, há uma consolidação do acesso terapêutico por meio da importação excepcional de produtos à base de *Cannabis*, regulamentada pela RDC nº 660/2022. Essa via permaneceu amplamente utilizada por pacientes, indicando que, apesar da expansão do portfólio nacional disponível em farmácias, a importação direta continua a desempenhar papel central no atendimento das demandas terapêuticas individuais. Esse contexto reflete simultaneamente o maior reconhecimento clínico das terapias canabinoides e as limitações ainda existentes na cadeia produtiva nacional, caracterizando um período de transição e amadurecimento do arcabouço regulatório e farmoquímico brasileiro.

Complementando a análise regulatória, os dados do Anuário da *Cannabis* Medicinal 2025 revelam a dimensão socioeconômica e estratégica desse mercado no Brasil. De acordo com o Anuário, o país ultrapassou a marca de 873 mil pacientes em tratamento com produtos derivados de *Cannabis*, evidenciando a consolidação dessas terapias no sistema de saúde. Esse avanço foi acompanhado por um faturamento setorial estimado em aproximadamente R\$ 971 milhões em 2025, valor próximo a um bilhão de reais anuais.<sup>13</sup> Tal crescimento expõe não apenas o potencial econômico do setor, mas, sobretudo, a fragilidade estrutural de uma cadeia produtiva ainda fortemente dependente da

importação de insumos e produtos acabados. Nesse contexto, o desenvolvimento de IFAs nacionais e a internalização de etapas produtivas emergem como elementos centrais para a redução de custos, o fortalecimento da soberania tecnológica e a ampliação sustentável do acesso terapêutico no país.

Essa pressão por sustentabilidade econômica e a necessidade de mitigar a fragilidade estrutural da cadeia produtiva impulsionaram a ANVISA a promover atualizações normativas estratégicas ao longo de 2025. Um marco fundamental desse movimento foi a realização da Consulta Pública para a revisão da RDC nº 327/2019, ocorrida entre abril e junho de 2025, com o objetivo de readequar os requisitos para a fabricação e comercialização desses produtos no país.<sup>14,15</sup> Somado a isso, a aprovação da abertura de um processo regulatório para revisar a RDC nº 660/2022 sinaliza um esforço institucional para conferir maior eficiência e segurança jurídica aos fluxos de acesso individualizado, buscando transitar de um modelo de excepcionalidade administrativa para uma estrutura industrial mais integrada e previsível.<sup>16</sup>

Embora a regulamentação brasileira tenha permitido, a partir de 2022, a importação de derivados vegetais de *Cannabis sativa* L. para fins de purificação e obtenção do fitofármaco CBD em grau farmacêutico no país, foi apenas na transição entre 2024 e 2025 que esse potencial técnico se concretizou no mercado.<sup>17</sup> Essa convergência entre o amadurecimento das diretrizes e a capacidade industrial nacional culminou na autorização do primeiro produto com IFA produzido em solo brasileiro: o *Canabidiol Life Science*, da FarmaUSA. Este marco altera a premissa de dependência externa identificada no período de 2020-2024, uma vez que a purificação do insumo passa a ser realizada em território nacional pela unidade fabril da *Life Science*, em São Paulo, a partir do processamento do extrato bruto importado.<sup>18,19,20</sup>

Com uma capacidade produtiva de até 800 kg por mês, essa iniciativa enfrenta a vulnerabilidade histórica do setor farmacêutico nacional, que depende da importação de cerca de 95% dos insumos globais. Ao internalizar esta etapa, mitigam-se os gargalos logísticos e a exposição às variações cambiais, estabelecendo as bases para a soberania tecnológica no biênio 2025-2026. Assim, o país transita para um modelo produtor verticalizado, onde a fabricação nacional torna-se o motor de sustentabilidade e democratização do acesso para a crescente base de pacientes do sistema de saúde.<sup>18,19</sup>

Por fim, o ano de 2025 marcou um avanço qualitativo adicional na maturidade regulatória brasileira com a promulgação da RDC nº 999/2025, que estendeu o arcabouço normativo da Cannabis medicinal ao uso veterinário.<sup>21</sup> Elaborada de forma articulada entre a ANVISA e o Conselho Federal de Medicina Veterinária (CFMV), a norma superou limitações históricas da Portaria nº 344/1998 ao autorizar, de maneira formal e padronizada, a prescrição de produtos à base de Cannabis para uso animal. Essa ampliação não representa apenas uma inovação regulatória, mas a incorporação efetiva de um novo segmento ao mercado regulado, com impacto direto sobre a demanda industrial. Do ponto de vista produtivo, a RDC nº 999/2025 atua como vetor estratégico para a expansão do consumo de IFA, favorecendo ganhos de escala, a consolidação da unidade fabril e o fortalecimento da competitividade do fitofármaco doméstico frente aos produtos importados. Dessa forma, a integração da medicina veterinária ao marco regulatório da Cannabis contribui para a verticalização da cadeia produtiva, para a redução da dependência externa e para o avanço da soberania tecnológica nacional.

## Conclusões

A análise comparativa entre o levantamento de Ferreira e Lombardo (2020-2024) e os dados consolidados em 2025 evidencia que o setor de Cannabis medicinal no Brasil atingiu um estágio de maturação industrial definitivo. A expansão no número de empresas detentoras de AS reflete o fortalecimento do mercado nacional e a preparação da infraestrutura produtiva para atender à crescente demanda terapêutica por produtos de grau farmacêutico.

O ano de 2025 consolidou-se como o ponto de ruptura com o ciclo de dependência externa. A convergência entre as atualizações normativas das RDCs nº 327/2019 e nº 660/2022, a promulgação da RDC nº 999/2025 e, primordialmente, a autorização do primeiro IFA nacional, estabelece as bases da soberania tecnológica no país. A capacidade de purificar fitocanabinoides em território brasileiro mitiga vulnerabilidades logísticas e cambiais, permitindo a verticalização da cadeia produtiva e a consequente redução de custos para o sistema de saúde.

Em última análise, a transição para o biênio 2025-2026 projeta um cenário onde a produção nacional integrada atua como o principal motor de sustentabilidade e democratização do acesso. Para a indústria farmoquímica brasileira, este avanço reafirma a competência técnica para liderar processos de alta complexidade, assegurando que o

tratamento dos pacientes seja sustentado por uma oferta interna segura, estável e tecnologicamente autônoma.

## Contribuições por Autor

A resenha sobre o artigo em referência e a inclusão de algumas observações são de Gabriel Castro e Silva.

## Conflito de interesse

Não há conflito de interesses.

## Agradecimentos

Agradeço ao PET-Química/IQ/UnB, à Secretaria de Educação Superior do Ministério da Educação (SeSU/MEC) e ao Decanato de Ensino de Graduação (DEG/UnB) por todo o apoio concedido através do Programa de Educação Tutorial. Agradeço também ao Instituto de Química (IQ/UnB) e à Universidade de Brasília pelo suporte e espaço fornecidos.

## Notas e referências

- 1 R. Mechoulam and L. Hanuš, Cannabidiol: an overview of some chemical and pharmacological aspects. Part I: chemical aspects, *Chemistry and Physics of Lipids*, 2002, **121**, 35–43.
- 2 M. A. ElSohly, M. M. Radwan, W. Gul, S. Chandra and A. Galal, in *Phytocannabinoids*, eds A. D. Kinghorn, H. Falk, S. Gibbons and J. Kobayashi, Springer International Publishing, Cham, 2017, **103**, 1–36.
- 3 C. M. Andre, J.-F. Hausman and G. Guerriero, Cannabis sativa: The Plant of the Thousand and One Molecules, *Front. Plant Sci.*
- 4 R. G. Pertwee, Cannabinoid pharmacology: the first 66 years, *British J Pharmacology*.
- 5 F. Taura, S. Sirikantaramas, Y. Shoyama, Y. Shoyama and S. Morimoto, Phytocannabinoids in Cannabis sativa: Recent Studies on Biosynthetic Enzymes, *Chemistry & Biodiversity*, 2007, **4**, 1649–1663.
- 6 M. Araújo, M. B. Almeida and L. L. N. Araújo, Mecanismo de ação dos canabinoides: visão geral, *BRJP*.
- 7 Search media - Wikimedia Commons, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?search=Cannabinoids+receptors+CB1+and+CB2+and+their+natural+distribution+in+the+human+body&title=Especial%3AMediaSearch&type=image>, (acessado 11 de janeiro de 2026).
- 8 I. Nacional, RESOLUÇÃO DA DIRETORIA COLEGIADA - RDC Nº 327, DE 9 DE DEZEMBRO DE 2019 - RESOLUÇÃO DA DIRETORIA COLEGIADA - RDC Nº 327, DE 9 DE DEZEMBRO DE 2019 - DOU - Imprensa Nacional, <https://www.in.gov.br/web/dou>, (accessed 11 January 2026).
- 9 I. Nacional, RESOLUÇÃO RDC Nº 660, DE 30 DE Março DE 2022 - DOU - Imprensa Nacional, <https://www.in.gov.br/web/dou>, (accessed 11 January 2026).
- 10 E. M. Ferreira and M. Lombardo, Produtos de Cannabis para fins medicinais no Brasil: Um panorama farmacêutico e sanitário de 2020 a 2024, *RSD*, **14**, 2025.
- 11 A. Muzio, Nutrientes para plantas de Cannabis, <https://growthjane.com/pt-br/nutrientes-cannabis-plantas/>, (accessed 11 January 2026).
- 12 Agência Nacional de Vigilância Sanitária (ANVISA), Consultas: Produtos de Cannabis, <https://consultas.anvisa.gov.br/#/cannabis/>
- 13 Anuário da Cannabis Medicinal 2025, <https://kayamind.com/anuario-da-cannabis-medicinal-2025/>, (accessed 12 January 2026).
- 14 Consulta Pública nº 1.316, de 27/03/2025, [https://anvisa.gov.br/datalegis.net/action/ActionDatalegis.php?acao=abrirTextoAto&link=S&tipo=CPB&numeroAto=00001316&seqAto=222&valorAno=2025&orgao=ANVISA/MS&cod\\_modulo=630&cod\\_memo=9373](https://anvisa.gov.br/datalegis.net/action/ActionDatalegis.php?acao=abrirTextoAto&link=S&tipo=CPB&numeroAto=00001316&seqAto=222&valorAno=2025&orgao=ANVISA/MS&cod_modulo=630&cod_memo=9373), (accessed 12 January 2026).
- 15 Entenda as propostas da consulta pública de atualização das regras para produtos de Cannabis de uso medicinal, <https://www.gov.br/anvisa/pt-br/assuntos/noticias-an>



visa/2025/entenda-as-propostas-da-consulta-publica-de-atualizacao-das-regras-para-produtos-de-cannabis-de-uso-medicinal, (accessed 12 January 2026).

- 16 Anvisa fará consulta pública para atualizar regulamentação da cannabis, <https://agenciabrasil.ebc.com.br/saude/noticia/2025-03/anvisa-fara-consulta-publica-para-atualizar-regulamentacao-da-cannabis>, (accessed 12 January 2026).
- 17 Agência Nacional de Vigilância Sanitária (ANVISA), Extrato do Circuito Deliberativo nº 637/2022 – Autorização de Excepcionalidade (SEI nº 25351.934955/2021-46), 2022, disponível em: [https://www.gov.br/anvisa/pt-br/composicao/diretoria-colegiada/reunioes-da-diretoria/extratos-dos-circuitos-deliberativos-1/2022/extrato-cd-637-2022-2013-autorizacao-de-excepcionalidade-sei\\_25351-934955\\_2021\\_46-1.pdf](https://www.gov.br/anvisa/pt-br/composicao/diretoria-colegiada/reunioes-da-diretoria/extratos-dos-circuitos-deliberativos-1/2022/extrato-cd-637-2022-2013-autorizacao-de-excepcionalidade-sei_25351-934955_2021_46-1.pdf), acessado em 12 de janeiro de 2026.
- 18 HOME, <https://farmausalifescience.com/pt/>, (accessed 12 January 2026).
- 19 N. Araujo, Primeiro produto de cannabis com IFA produzido no Brasil é autorizado pela Anvisa - Associação Brasileira das Indústria de Insumos Farmacêuticos, <https://abiquifi.org.br/associado-em-foco/primeiro-produto-de-cannabis-com-ifa-produzido-no-brasil-e-autorizado-pela-anvisa/>, (accessed 12 January 2026).
- 20 G. Ventura, Empresa será primeira a produzir IFA de CBD no Brasil, <https://www.cannabisesaude.com.br/farmausa-ifa-cbd/>, (accessed 12 January 2026).
- 21 I. Nacional, RESOLUÇÃO DA DIRETORIA COLEGIADA ANVISA Nº 999, DE 24 DE NOVEMBRO DE 2025 - DOU - Imprensa Nacional, <https://www.in.gov.br/web/dou>, (accessed 12 January 2026).

# Da tabela periódica à soberania nacional: uma análise crítica sobre os elementos estratégicos do Brasil

DOI: 10.5281/zenodo.18468133

Iago Cezario de Souza<sup>a\*</sup>

This review analyzes the role of chemical elements as pillars for a nation's sovereignty and technological development. The analysis delves into the paradox of countries rich in mineral resources that nonetheless remain on the periphery of global value chains, acting as mere exporters of raw materials. It discusses how the possession of elements such as niobium, rare earths, and other strategic metals does not automatically translate into economic or technological power. The main thesis argued is that true sovereignty lies not in geological abundance, but in the intellectual and industrial capacity to transform these resources into high-technology products. It concludes that a robust and continuous investment in science, technology, and long-term industrial policies is the only path to convert subsurface wealth into sustainable prosperity and national development.

Esta resenha analisa a questão dos elementos químicos como pilares para a soberania e o desenvolvimento tecnológico de uma nação. A análise aprofunda o paradoxo de países ricos em recursos minerais que, no entanto, permanecem à margem das cadeias de valor globais, atuando como meros exportadores de matéria-prima. Discute-se como a posse de elementos como nióbio, terras raras e outros metais estratégicos não se traduz automaticamente em poder econômico ou tecnológico. A principal tese defendida é que a verdadeira soberania não reside na abundância geológica, mas na capacidade intelectual e industrial de transformar esses recursos em produtos de alta tecnologia. Conclui-se que um investimento robusto e contínuo em ciência, tecnologia e políticas industriais de longo prazo é o único caminho para converter a riqueza do subsolo em prosperidade sustentável e desenvolvimento nacional.

*Universidade de Brasília (UnB). Campus Darcy Ribeiro. Instituto de Química (IQ/UnB).*

*\*E-mail: iagocezario@gmail.com*

**Palavras-chave:** Elementos estratégicos; soberania tecnológica; agregação de valor; política de inovação.

Recebido em 11 de janeiro de 2026,

Aprovado em 30 de janeiro de 2026,

Publicado em 03 de fevereiro de 2026.

## Introdução

**A discussão sobre recursos naturais estratégicos é um pilar fundamental na geopolítica e na economia global. No século XXI, essa discussão transcende os combustíveis fósseis e se aprofunda na tabela periódica, onde elementos específicos se tornam a base para a revolução tecnológica, a transição energética e a segurança nacional. O artigo de A. B. de Oliveira e J. D. da Silva surge nesse contexto como uma obra de singular importância, funcionando como um diagnóstico preciso e um manifesto para a ciência brasileira. Publicado em um momento simbólico, o texto utiliza a celebração dos 150 anos da tabela periódica como pano de fundo para refletir sobre o papel do Brasil no cenário global de recursos minerais.<sup>1,2</sup>**

Elementos como o nióbio, do qual o Brasil detém as maiores reservas mundiais, são cruciais para a produção de ligas metálicas de alta performance usadas na indústria aeroespacial e de infraestrutura. As terras raras são

indispensáveis para a fabricação de ímãs de alta potência, essenciais em motores de veículos elétricos e turbinas eólicas. O lítio e o cobalto, embora não sejam o foco principal deste artigo, são a alma das baterias que movem a eletrônica moderna e a mobilidade elétrica. Portanto, a posse desses recursos confere a uma nação não apenas riqueza, mas também poder de barganha e influência geopolítica.<sup>2,3</sup>

O artigo em questão, no entanto, vai além da simples catalogação das riquezas brasileiras. Ele expõe uma ferida aberta na economia nacional: a "maldição dos recursos". Historicamente, o Brasil tem se posicionado como um grande exportador de *commodities* minerais brutas, capturando apenas uma fração mínima do valor agregado que é gerado nas etapas subsequentes de processamento, purificação e fabricação de produtos de alta tecnologia. O texto argumenta, de forma contundente, que a mera exportação de minério de ferro (Fe) ou cassiterita não gera desenvolvimento sustentável, empregos de qualidade ou soberania tecnológica.<sup>3</sup>

Nesse sentido, a obra se posiciona como um chamado à comunidade científica e aos formuladores de políticas públicas. A mensagem é clara: a soberania nacional no século XXI não será garantida apenas pela posse geológica dos elementos, mas pela capacidade intelectual e tecnológica de transformá-los. O artigo convida a uma reflexão profunda sobre o modelo de desenvolvimento do país, questionando por que uma nação tão rica em recursos minerais ainda importa fertilizantes, semicondutores e produtos tecnológicos de alto valor agregado. A resenha que se segue buscará aprofundar essa análise, explorando as metodologias implícitas, os resultados apresentados e as conclusões que ecoam como um desafio para o futuro do Brasil.

## Metodologia

### 1. Seleção estratégica de casos

Os autores abordaram os elementos da tabela periódica que ilustram diferentes facetas do desafio brasileiro. Escolheram um portfólio representativo que ilustra diferentes facetas do desafio brasileiro. Incluíram-se elementos de base da economia (Ferro, Cobre), gigantes adormecidos com potencial tecnológico (Índio, Manganês), joias da coroa (Nióbio), elementos ligados à segurança alimentar (a tríade NPK) e fronteiras da nova tecnologia (Terras Raras, Carbono em suas formas alotrópicas avançadas). Essa seleção funciona como um estudo de múltiplos casos, onde cada elemento serve como uma lente para examinar um problema mais amplo.<sup>4,5</sup>

**Figura 1.** A tabela periódica, com destaque para os grupos dos metais lantanídeos e de terras raras. Extraído da referência 2.

Sc	Terras Raras													
Y														
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu

### 2. Abordagem multidisciplinar

Para cada elemento, é aplicado uma análise que integra aspectos da química pura (propriedades, reatividade), da engenharia de materiais (aplicações, desenvolvimento de ligas), da economia (mercado, cadeias de valor), da geologia

(reservas, extração) e da política científica e tecnológica (necessidade de investimento, agregação de valor). Essa fusão de perspectivas é um dos pontos mais fortes do texto, pois reflete a complexidade do mundo real, onde a ciência não opera em um vácuo.

### 3. Contraste entre potencial e realidade

De forma recorrente, os autores utilizam uma estrutura argumentativa que primeiro apresenta o "potencial": as vastas reservas, as propriedades químicas únicas, a demanda global crescente. Em seguida, contrapõem essa visão com a "realidade": o baixo beneficiamento do mineral no país, a exportação de matéria-prima barata, a falta de domínio tecnológico nas etapas mais lucrativas da cadeia produtiva. Essa técnica retórica não é apenas eficaz para o engajamento do leitor, mas também serve como uma ferramenta de diagnóstico, expondo o "gap" de inovação que o Brasil precisa preencher.<sup>5</sup>

### 4. Análise histórica e prospectiva

A análise não se limita a uma fotografia do presente. Para elementos como as Terras Raras, os autores detalham o histórico das atividades extrativas desde o século XIX, mostrando como as decisões do passado moldaram a situação atual. Ao mesmo tempo, para todos os elementos, há um forte componente prospectivo. Os autores analisam tendências futuras como a demanda por nanomateriais de carbono ou por baterias mais eficientes e projetam como esses elementos estratégicos se encaixam nesse futuro, defendendo a necessidade de o Brasil se preparar hoje para ser competitivo amanhã.

A metodologia também se apoia em uma argumentação baseada em autoridade. A credibilidade do artigo em questão é amplificada pelo fato de que cada seção é assinada por especialistas com vasta experiência prática e acadêmica no elemento em questão. Isso confere ao texto um peso que vai além da simples revisão de literatura, transformando-o em um parecer qualificado, na qual visa influenciar a comunidade e os tomadores de decisão. Em suma, a metodologia do editorial é robusta e adequada ao seu propósito. Ao combinar estudos de caso, multidisciplinaridade, análise contrastiva, perspectiva histórica e autoridade acadêmica, assim foi possível construir um argumento poderoso e convincente sobre a necessidade de uma nova estratégia nacional para os recursos minerais do Brasil.<sup>6-8</sup>

**Figura 2.** Cronologia da separação das terras (a) céricas e (b) ítricas por seus respectivos descobridores a partir



resultado é um vislumbre de um caminho alternativo: um em que o Brasil pode competir não apenas com base na abundância de recursos, mas na excelência de seus pesquisadores. A discussão enfatiza que o investimento público em ciência e tecnologia é o catalisador essencial para transformar essa promessa em realidade, criando patentes, produtos e empresas de base tecnológica.<sup>13,16</sup>

Em síntese, os resultados e a discussão pintam um quadro complexo. Eles celebram a riqueza natural do Brasil, mas, ao mesmo tempo, expõem as falhas estruturais de seu modelo de desenvolvimento. A grande contribuição é conectar esses pontos, argumentando que a solução para esse paradoxo não está na geologia ou na economia por si só, mas na intersecção entre elas, catalisada pela química e pela engenharia.

## Conclusões

O editorial de A. B. de Oliveira e J. D. da Silva é mais do que uma simples coletânea de artigos, é um documento estratégico de profundo valor para a nação. As conclusões que emanam de sua leitura são um chamado sóbrio e urgente à reflexão e à ação. A principal conclusão é a de que a riqueza geológica, por si só, não é sinônimo de desenvolvimento. Sem conhecimento, tecnologia e uma estratégia industrial clara, a abundância de recursos pode se tornar uma armadilha que perpetua a dependência e o subdesenvolvimento, um ciclo que o Brasil conhece muito bem.

Uma segunda conclusão fundamental é a centralidade da ciência e da tecnologia como vetores de agregação de valor. O texto demonstra, elemento por elemento, que as etapas mais lucrativas e estratégicas das cadeias produtivas minerais residem no processamento, na purificação, na criação de novas ligas e materiais e na fabricação de dispositivos de alta tecnologia. Portanto, a soberania sobre os recursos naturais só será completa quando o país dominar o ciclo tecnológico em sua totalidade. Isso implica, necessariamente, em um investimento robusto e contínuo em universidades, institutos de pesquisa e na formação de pessoal altamente qualificado.<sup>2,14</sup>

Também é importante destacar a necessidade de uma política industrial e de inovação de longo prazo, articulada e resiliente a mudanças governamentais. A exploração de recursos minerais e o desenvolvimento de novas tecnologias são empreendimentos que demandam décadas de investimento e planejamento. O artigo deixa implícito que a

ausência de uma visão estratégica coesa e duradoura tem sido um dos principais entraves para que o Brasil capitalize sobre suas vantagens naturais. É preciso criar um ambiente de negócios que incentive a instalação de indústrias de transformação, que fomente a colaboração entre universidades e empresas e que utilize o poder de compra do estado para impulsionar a inovação.<sup>17</sup>

Por fim, a obra conclui com uma nota de otimismo qualificado. Ao destacar a competência da comunidade científica brasileira, como no caso da nanotecnologia do carbono, o editorial mostra que o país possui o capital humano necessário para virar o jogo. A mensagem final é, portanto, um misto de alerta e esperança. O alerta é que o tempo está se esgotando; as janelas de oportunidade abertas pelas novas revoluções tecnológicas não permanecerão abertas para sempre. A esperança é que, com visão estratégica, investimento e vontade política, o Brasil possa, finalmente, transformar sua riqueza mineral em prosperidade sustentável, conhecimento e soberania para o seu povo. E não oferecendo respostas fáceis, mas criando as perguntas certas para apontar o caminho do sucesso.

## Contribuições por Autor

A resenha sobre o artigo em referência e a inclusão de observações são de Iago Cezario de Souza.

## Conflito de interesse

Não há conflito de interesses.

## Agradecimentos

Ao grupo PET-Química/IQ/UnB, à Secretaria de Educação Superior do Ministério da Educação (SeSU/MEC) e ao Decanato de Ensino de Graduação (DEG/UnB) pelo apoio ao Programa de Educação Tutorial pela oportunidade concedida. Ao Instituto de Química (IQ/UnB) e à Universidade de Brasília pelo suporte e espaço fornecidos.

## Notas e referências

- 1 A. B. de Oliveira e J. D. da Silva, Elementos químicos estratégicos para o Brasil, *Quim. Nova*, 2020, **42**, 1-10.
- 2 P. C. de Sousa Filho e O. A. Serra, Terras Raras no Brasil: Histórico, Produção e Perspectivas, *Quim. Nova*, 2014, **37**, 753-760.



- 3 R. A. Alves e P. S. de Melo Jr., Potencial dos depósitos de lítio no Vale do Jequitinhonha: desafios e oportunidades, *Rem: Rev. Esc. Minas*, 2022, **75**, 5-12.
- 4 F. L. Pereira, Produção de ferro e cobre no Brasil: um panorama, em *Anuário Mineral Brasileiro*, ed. Agência Nacional de Mineração, Brasília, 2021, pp. 20-35.
- 5 G. H. Ribeiro e L. M. Santos, Desenvolvimento de aços microligados ao nióbio de alta resistência, *Mater. Res.*, 2018, **21**, e20170123.
- 6 P. J. de Almeida, Geochemical characterization of Brazilian tin deposits, *Geochim. Cosmochim. Acta*, 2022, **32**, 115-130.
- 7 C. R. de Souza, Advances in the synthesis of special alloys for the aerospace industry, *Angew. Chem., Int. Ed.*, 2021, **60**, 1000-1020.
- 8 V. G. Ferreira, Graphene and carbon nanotubes: from laboratory to industrial applications, *ACS Nano*, 2023, **17**, 500-515.
- 9 R. M. Martins, Bio-based fertilizers and the future of sustainable agriculture, *Coord. Chem. Rev.*, 2019, **38**, 45-60.
- 10 E. P. da Cunha, The environmental impact of rare earth element mining and processing, *Environ. Sci. Technol.*, 2020, **54**, 80-95.
- 11 I. F. Gomes, High-value materials from strategic minerals: a review, *Adv. Mater.*, 2022, **34**, 2101234.
- 12 S. A. de Lima, Lithium and cobalt: key elements for the next generation of battery technology, *J. Power Sources*, 2021, **49**, 229500.
- 13 T. B. de Andrade, The role of materials science in adding value to natural resources, *Nat. Rev. Mater.*, 2018, **3**, 18001.
- 14 K. W. de Carvalho, Strategic planning for the energy transition: a materials-based approach, *Energy Environ. Sci.*, 2019, **12**, 300-315.
- 15 Z. L. de Barros, Public policies for science and technology as a driver for national development, *Sci. Adv.*, 2023, **9**, eadg1234.
- 16 L. C. de Faria, A cadeia produtiva do Manganês no Brasil e a necessidade de políticas de incentivo à indústria de ligas especiais, *Rev. Bras. Geociênc.*, 2021, **51**, e20200115.
- 17 B. M. Nogueira e H. D. da Fonseca, Síntese e caracterização de catalisadores a base de óxidos de nióbio para produção de biodiesel, *Catal. Today*, 2023, **48**, 114120.

# Quimiometria e infravermelho: uma análise forense para falsificação do papel moeda brasileiro

DOI: 10.5281/zenodo.18462301

Anthony Monteiro Lima <sup>a\*</sup>

Fraudes envolvendo falsificação do papel moeda são extremamente comuns no Brasil e se mostram cada vez mais difíceis de se localizar. Há um crescimento da utilização de técnicas espectroscópicas para atividades forenses, tendo em vista seu caráter não destrutivo de amostra. O presente artigo busca revisar o desenvolvimento de um estudo da utilização de espectroscopia de infravermelho aliada com conceitos de quimiometria para se obter uma análise forense precisa e de baixo custo.

Fraud involving the counterfeiting of banknotes is extremely common in Brazil and is proving increasingly difficult to detect. There is a growing use of spectroscopic techniques for forensic activities, given their non-destructive nature. This article aims to review the development of a study using infrared spectroscopy combined with chemometrics concepts to obtain a precise and low-cost forensic analysis.

<sup>a</sup>Universidade de Brasília (UnB). Campus Darcy Ribeiro. Instituto de Química (IQ/UnB).

\*E-mail: [anthonymonteiro2877@gmail.com](mailto:anthonymonteiro2877@gmail.com)

**Palavras-chave:** quimiometria; infravermelho; ciência forense

Aceito em 11 de janeiro de 2026,

Aprovado em 25 janeiro de 2026,

Publicado em 03 de fevereiro de 2026.

## Introdução

**As ciências forenses são dedicadas ao estudo e interpretação de vestígios de infrações e crimes, com o intuito de colaborar com as autoridades na elaboração de hipóteses para autores, excluir suspeitos e confirmar métodos utilizados nas práticas dos delitos. A evolução constante da tecnologia permite que, atualmente, estas ciências sejam multidisciplinares, envolvendo diversas áreas do conhecimento e incluindo, portanto, a química.<sup>1</sup>**

A química, por sua vez, tem um papel importantíssimo dentro da perícia forense, visto que há uma necessidade de eficácia, padronização e manutenção da integridade do vestígio.<sup>1,2</sup> Para a garantia destas necessidades, a química possui diversos métodos analíticos que buscam estes mesmos objetivos, principalmente no âmbito forense que envolve documentos, conhecido como documentologia ou perícia documental. Este tipo de perícia possui foco na análise macro e microscópica de materiais que possam determinar a origem e atribuir autenticidade à um documento, como papéis, tintas, marcas d'água e outros. Por isso, a análise minuciosa que não degrade a amostra, mantendo-a o mais próximo ao estado de quando encontrada pela primeira vez, é sempre preferencial.<sup>1, 2, 3</sup>

Dentre as diversas infrações cometidas com documentos, uma das mais conhecidas e mais recorrentes é a falsificação do papel-moeda.<sup>4, 5</sup> O primeiro crime desse

âmbito julgado no Brasil data do ano de 1756, quando o país era ainda dividido em capitânias.<sup>4</sup> De acordo com dados do Banco Central do Brasil, apenas no mês de dezembro de 2025 foi contabilizado um total de 184.385 cédulas falsificadas apreendidas, sendo a maioria (87.793) cédulas de 100 Reais.<sup>6</sup> A segunda família do Real, lançada em 2010 pelo Banco Central, possui diversos elementos de segurança em suas cédulas que dificultam a sua falsificação.<sup>7</sup> Mesmo assim, com os avanços tecnológicos, a identificação de cédulas falsas se torna uma tarefa propícia para métodos de análise extremamente sensíveis, tendo em vista que muitas técnicas podem ser destrutivas e as análises por técnicas ópticas e microscópicas, que preservam a integridade da amostra, podem ser inconclusivas.<sup>3, 5</sup>

Um dos métodos mais empregados na perícia documental é a utilização do Comparador Espectral de Vídeo, VSC (do inglês *Video Spectral Comparator*), que consiste na combinação de várias fontes luminosas, incluindo luz visível (VIS), ultravioleta (UV) e infravermelho (IR). Porém, esta técnica possui aplicações muito específicas em que se é possível diferenciar um aspecto caracterizador do documento por um único comprimento de onda, além de não ser tão preciso quanto técnicas espectroscópicas.<sup>5, 8</sup> Sendo assim, técnicas sensíveis como espectroscopia no infravermelho são alternativas seguras ao VSC, sendo empregadas juntamente com métodos multivariados de quimiometria devido à complexidade dos materiais e diversidade de dados obtidos pela análise espectroscópica. A análise de componentes

principais (PCA) e análise discriminante de mínimos quadrados parciais (PLSDA) são as análises quimiométricas mais empregadas no ramo forense.<sup>2,5</sup>

Tendo em vista as questões expostas, Braz e colaboradores elaboraram um estudo para desenvolver uma metodologia aplicável às perícias documentais em cédulas do Real, com o objetivo de identificar cédulas falsificadas por técnicas de espectroscopia FTIR associadas com quimiometria. O presente artigo tem como objetivo revisar o trabalho destes pesquisadores e sua metodologia utilizando espectroscopia ATR-FTIR (espectroscopia na região do infravermelho com transformada de Fourier e reflectância total atenuada) e MicroNIR (micro espectroscopia na região do infravermelho próximo), em conjunto com as análises por PCA e PLSDA, para diferenciar cédulas genuínas de cédulas falsificadas ao analisar elementos de segurança e outras regiões pontuais de cédulas de 100 Reais, visando o baixo custo, rapidez e a preservação da amostra.<sup>5</sup>

## Metodologia

A espectroscopia de infravermelho com transformada de Fourier (FTIR) consiste em uma técnica que, como todas as técnicas espectroscópicas, analisa a interação da matéria com a radiação, neste caso a radiação infravermelha. A absorção dessa radiação se dá pelo momento dipolar intermolecular, cujas vibrações são únicas para cada grupo funcional. Este tipo de espectroscopia é geralmente dividido pela região do infravermelho utilizada para irradiar a amostra, podendo ser próxima (NIR, do inglês *near infrared*), no meio (MIR, *mid infrared*) ou distante (FIR, *far infrared*) do visível. o infravermelho próximo fornece informações sobre grupos funcionais, já as regiões mais afastadas permitem caracterizar as ligações mais detalhadamente. As análises de infravermelho são geralmente realizadas com amostras líquidas, mas com o advento da técnica de reflectância total atenuada (ATR-IR), é possível utilizar amostras sólidas, pois esta técnica compreende materiais espessos e complexos como a superfície de objetos pequenos.<sup>5,9</sup>

A quimiometria, por sua vez, se propõe a resolver problemas da química com uma variedade de métodos não necessariamente relacionados a ela. Esses métodos provêm da matemática, estatística e computação, com o objetivo de obter o máximo de informação química a partir de dados precisos, assim podendo selecionar ou planejar experimentos com eficácia e maiores chances de sucesso. A análise correta dos dados obtidos em experimento permite identificar problemas,

interferências, ou prevenir estes, utilizando conceitos como álgebra linear e programação para manter padrões confiáveis, reprodutíveis e eficientes. A base dos métodos mais atuais da quimiometria é a PCA (do inglês, *Principal Component Analysis*), que utiliza uma manipulação de matriz constituída dos dados experimentais a fim de representar as variações entre eles num número reduzido de fatores. Os dados são distribuídos em três matrizes diferentes (*scores*, *loadings* e *resíduo*) formadas com base na similaridade destes dados, em seguida agrupados em duas componentes principais (PC1 e PC2), também com base na similaridade, para por fim construir um plano bidimensional em que se é possível analisar a dispersão dos dados.<sup>5,10</sup>

A PLSDA (*partial least squares discriminant analysis*) é um outro modelo quimiométrico muito utilizado na classificação de amostras desconhecidas, baseado na redução da dimensão dos dados e construção de modelos de predição. É subdividido em PLS1-DA, que classifica amostras binárias, e PLS2-DA, que classifica amostras multivariadas como as abordadas por Braz e pesquisadores. Para a construção do modelo, amostras anômalas são descartadas para mitigar interferências; em seguida, o modelo é treinado calculando-se métricas de desempenho como taxas de falso positivo (FP), verdadeiros negativos (VN), falsos negativos (FN) e parâmetros de estatística (sensibilidade, especificidade, acurácia), por fim validando-se o modelo pela eficiência em sua classificação.<sup>5,11</sup>

As amostras selecionadas por Braz e pesquisadores foram cédulas de 100 Reais, considerando que representam a maioria dentre as falsificações.<sup>5,6</sup> Um total de 100 cédulas, 50 falsas e 50 verdadeiras, foram analisadas por infravermelho médio com ATR (ATR-FTIR) e infravermelho próximo (MicroNIR), sem preparo prévio além de manipulação cuidadosa para evitar interferências. As cédulas verdadeiras foram cedidas por uma instituição bancária de Vila Velha, no Espírito Santo, enquanto as falsificadas foram cedidas pela Polícia Civil do Espírito Santo, originadas de apreensões. Foram analisadas dez regiões (P) das amostras, cada uma em triplicata, em que 8 se referem às regiões adotadas pelo Banco Central do Brasil como elementos de segurança: P1 - faixa holográfica; P2 - elementos fluorescentes; P3 - quebra-cabeça; P4 - marca-d'água; P5 - alto relevo; P6 - fio de segurança; P7 - microimpressões e P8 - número oculto. Braz e colaboradores escolheram as outras duas regiões (9 e 10) por possuírem coloração intensa, como esquematizado pela Figura 1.<sup>5,6</sup>

**Figura 1.** Marcação das 10 regiões analisadas nas cédulas de 100 Reais. Extraído da referência 5.



Para as análises, no infravermelho médio, Braz e pesquisadores utilizaram um espectrômetro FTIR Cary 630 equipado com ATR-FTIR com cristal de diamante, obtendo-se 16 *scans* por aquisição e 8 *scans* de *background* por amostra, com resolução de 4 cm<sup>-1</sup> na faixa espectral de 4000 a 650 cm<sup>-1</sup>, modo absorbância. No infravermelho próximo, o espectrômetro utilizado foi o NIR Modelo Pro 1700, na faixa espectral de 908 a 1676 nm, performando 125 *scans* de amostra e 400 de varredura no modo absorbância.

O tratamento dos dados foi feito, inicialmente, utilizando o *software* Matlab versão R2024b para calcular os valores médios de cada triplicata. Em seguida, o *software* OriginPro 8.5 versão SR1 para produzir os gráficos dos espectros de cada região das cédulas, com o objetivo de identificar as bandas que poderiam determinar a autenticidade delas.

O modelo de PCA foi construído no *software* Orange Data Mining Tool (ODTM) versão 3.37.0, separando os dados em tabelas por regiões e identificando as classes como “autêntica” e “falsa”. O modelo foi construído com a seleção de 10 componentes e normalização das variáveis, deixando as 20 primeiras a mostra. Para serem colocados no modelo, os espectros foram submetidos a três pré-processamentos: Savitzky-Golay *filter* (janela 5 e ordem polinomial de 2); *baseline correction* do tipo linear com *background action* de substrato e normalização vetorial dos espectros. Já o modelo de PLSDA foi produzido com o *software* Matlab, dividindo os dados em um subconjunto de treinamento (60% das amostras) e um subconjunto de teste externo (40% das amostras), pelo método Kennard-Stone. Braz e colaboradores cruzaram os dados de treinamento pelo método *k-fold*, utilizando os

subconjuntos para seleção do número ótimo de variáveis latentes, minimizando a taxa de erro de classificação da validação cruzada. Avaliou-se o modelo utilizando parâmetros de sensibilidade, especificidade e exatidão, conforme as Equações 1 a 3:

$$\text{Sensibilidade} = \frac{VP}{VP + FN} \quad (1)$$

$$\text{Especificidade} = \frac{VN}{VN + FP} \quad (2)$$

$$\text{Exatidão} = \frac{VP + VN}{VP + VN + FP + FN} \quad (3)$$

em que VP é verdadeiro positivo; VN é verdadeiro negativo; FP é falso positivo e FN é falso negativo.<sup>5</sup>

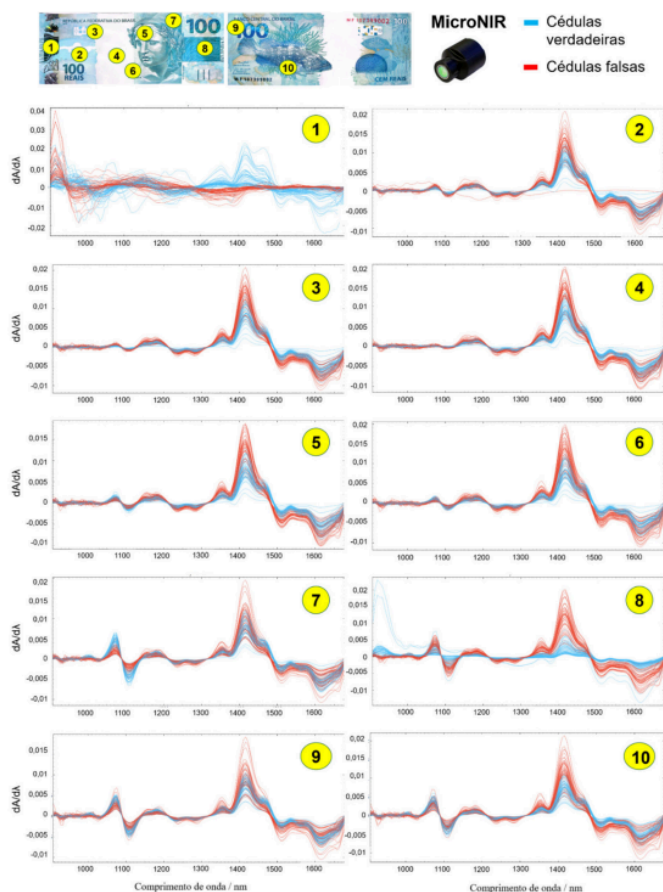
## Resultados e discussão

Os espectros obtidos foram comparados, relacionando-os por região analisada, a fim de encontrar disparidades padrões entre cédulas autênticas e falsificadas. Com o auxílio do MicroNIR, encontrou-se uma maior diferença nos espectros das regiões P1, P7 e P8, conforme a Figura 2. Braz e colaboradores atribuíram essa diferença à presença dos elementos de segurança, como a faixa holográfica e elementos fluorescentes em P1 e a calcografia nos pontos P7 e P8. Foram analisadas também as variâncias conforme o modelo quimiométrico PCA, utilizando-se gráficos de *scores*, obtendo-se uma variância acumulada (somatório de PC1 e PC2) de 78% para P1, 77% para P7 e 94% para P8. Observa-se, portanto, uma maior discrepância em P8 dentre os pontos analisados, que também fica evidente no gráfico de separação das amostras por PC1 na Figura 3.<sup>5</sup>

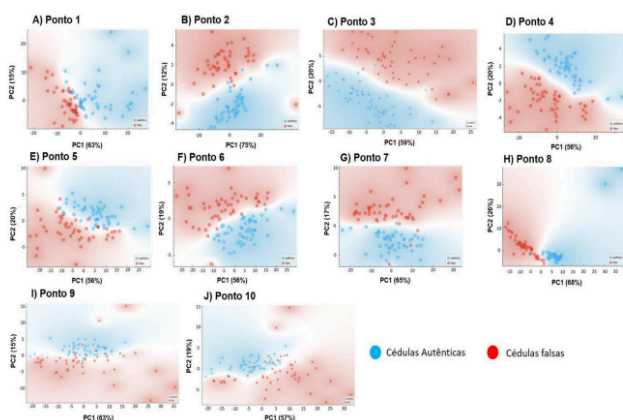
Para atestar a eficácia do método em estudo, um modelo de PLSDA foi construído com objetivo de classificar a amostra em autêntica ou não, com base nos espectros de MicroNIR e a classe original de algumas amostras. Portanto, calculou-se a probabilidade das amostras analisadas pertencerem à classe autêntica, e a Figura 4 evidencia a separação entre autêntica, falsa, teste e treino. O método se mostra efetivo ao não possuir nenhum falso negativo ou falso positivo, a não ser na análise conjunta dos pontos em que se observa dois falsos positivos num total de mil pontos, ou seja, uma taxa de erro de apenas 0,2%.<sup>5</sup>

**Figura 2.** Espectros MicroNIR de células autênticas (azuis) e falsas (vermelhas) de P1 a P10, após aplicação da primeira derivada. Extraído da referência 5.

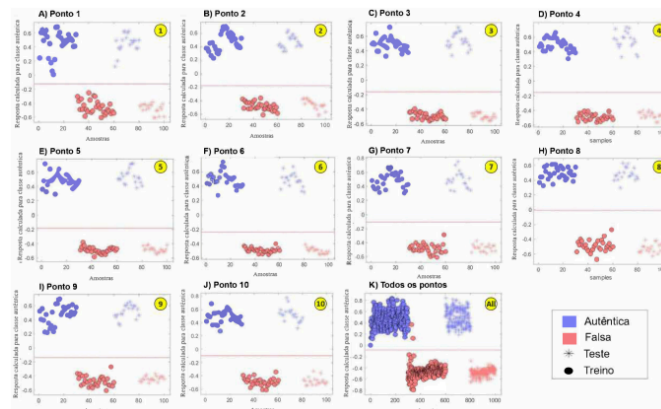




**Figura 3.** Gráficos de *scores* do modelo de PCA de P1 a P10 no MicroNIR. Extraído da referência 5.



**Figura 4.** Resposta calculada para o modelo PLSDA das análises no MicroNIR para a probabilidade das amostras serem autênticas. Extraído da referência 5.



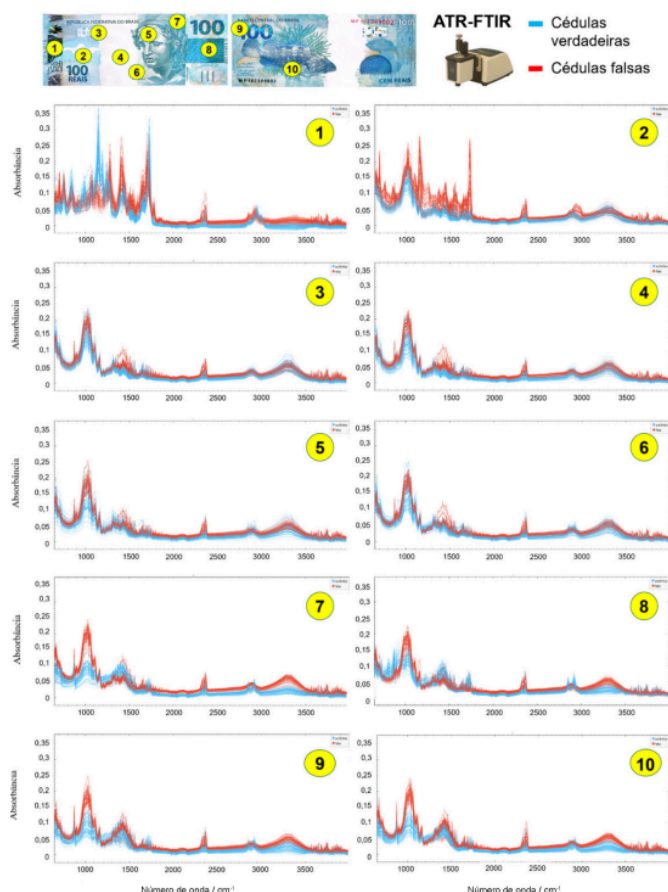
Com a intenção de ter uma avaliação mais aprofundada, Braz e pesquisadores analisaram todos os espectros obtidos de forma conjunta, de acordo com parâmetros de sensibilidade, especificidade, precisão e exatidão do método; além das taxas de erro, acerto e amostras não atribuídas. O modelo de predição de amostras externas obteve todos os resultados iguais a 1,00, indicativo de 100% de eficácia, de acordo com a Tabela 1.<sup>5</sup>

**Tabela 1.** Resultado da validação do modelo PLSDA para o MicroNIR. Extraído da referência 5.

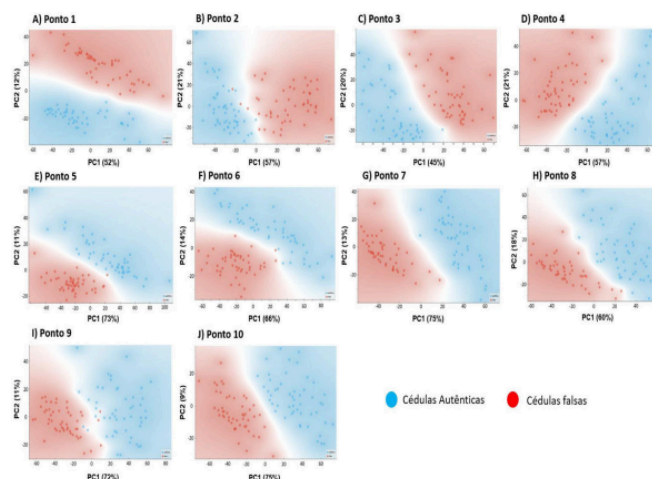
Modelo	Classe	Sens.	Espec.	Precisão
Treino	autêntica	1,00	0,99	0,99
	falsa	0,99	1,00	1,00
Validação cruzada	autêntica	1,00	0,99	0,99
	falsa	0,99	1,00	1,00
Predição de amostras ext.	autêntica	1,00	1,00	1,00
	falsa	1,00	1,00	1,00
Taxa de erro: 0,00 Taxa de acerto: 1,00 Exatidão: 1,00 Não atribuídas: 0,02				

Já na análise por ATR-FTIR, os pontos que apresentaram maior discrepância foram P7, P9 e P10, como observado na Figura 5. O modelo de PCA obteve, em sua somatória de PC1 e PC2, uma variância acumulada de 88% para P7, 83% para P9 e 84% para P10. Com isto, além da diferenciação visual, pode-se determinar a autenticidade das cédulas, conforme a Figura 6:<sup>5</sup>

**Figura 5.** Espectros ATR-FTIR de cédulas verdadeiras (azul) e falsas (vermelho) de P1 a P10. Extraído da referência 5.



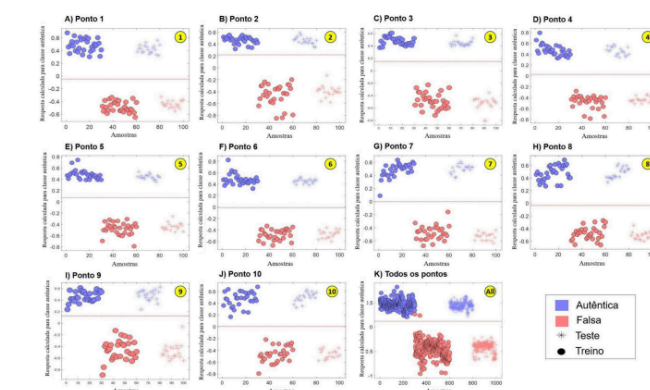
**Figura 6.** Gráficos de *scores* da PCA de P1 a P10 no ATR-FTIR. Extraído da referência 5.



geralmente feitas em impressoras comuns por sistema CMYK (do inglês, *cyan, magenta, yellow, key*). O MicroNIR se mostrou eficiente em identificar variações relacionadas à celulose e aos pigmentos orgânicos, enquanto o ATR-FTIR evidencia com clareza as diferenças químicas presentes nos elementos de segurança.<sup>5</sup>

Um modelo PLSDA também foi construído para as análises em ATR-FTIR, testando-se o desempenho do modelo a partir dos mesmos parâmetros utilizados para o MicroNIR, conforme a Figura 7 e a Tabela 2.<sup>5</sup>

**Figura 7.** Resposta calculada para o modelo PLSDA das análises no ATR-FTIR. Extraído da referência 5.



**Tabela 2.** Resultado da validação do modelo PLSDA para o ATR-FTIR. Extraído da referência 5.

Modelo	Classe	Sens.	Espec.	Precisão
Treino	autêntica	1,00	0,99	0,99
	falsa	0,99	1,00	1,00
Validação cruzada	autêntica	1,00	0,99	0,99
	falsa	0,99	1,00	1,00
Predição de amostras ext.	autêntica	1,00	1,00	1,00
	falsa	1,00	1,00	1,00
Taxa de erro: 0,00		Taxa de acerto: 1,00	Exatidão: 1,00	
		Não atribuídas: 0,02		

Os dados obtidos no ATR-FTIR confirmam a influência dos elementos de segurança na diferenciação das cédulas, pois as regiões de resultados mais expressivos são as regiões com calcografia nas cédulas autênticas. Comparando MicroNIR com ATR-FTIR, observa-se que o fator da impressão do papel moeda em intaglio é um ponto crítico para a identificação de autenticidade, visto que as falsificações são

## Conclusões

Braz e colaboradores obtiveram resultados excelentes para demonstrar a eficácia das técnicas MicroNIR e ATR-FTIR na análise forense, com 100% de acurácia, sensibilidade e especificidade nos modelos de PLSDA para teste externo. A precisão estatística alinhada com o caráter não destrutivo e mínimo de preparo amostral do estudo se



mostram em perfeita sintonia com as necessidades da ciência forense. O MicroNIR traz a otimização por sua portabilidade, permitindo análise em campo e redução de custos, apesar de ser limitado em alguns pontos, visto que P1 e P8 foram mais discriminantes principalmente pelo modelo PCA. Já o ATR-FTIR, apesar de não ter o caráter portátil, permite uma análise mais aprofundada e específica que pode auxiliar no detalhamento da infração. Braz e pesquisadores inovaram ao associar métodos analíticos com quimiometria, assim trazendo um desempenho de 100% de acerto e demonstrando a robustez do método proposto, mesmo com baixo custo e utilização de material portátil. Assim, comprova-se a aplicabilidade prática do estudo na área de documentoscopia e suas delegações no combate à fraude fiscal em papel moeda.<sup>5</sup>

## Contribuições por Autor

O artigo, a revisão de referências e a inclusão de algumas observações são de Anthony Monteiro.

## Conflito de interesse

Não há conflito de interesses.

## Agradecimentos

Ao Grupo PET-Química/IQ/UnB/MEC, à Secretaria de Educação Superior do Ministério da Educação e ao Decanato de Ensino de Graduação (DEG/UnB) pelo apoio. Ao Programa de Educação Tutorial pela bolsa concedida. Ao Instituto de Química da Universidade de Brasília (IQ/UnB) pelo suporte e espaço fornecidos.

## Notas e referências

- 1 F. de Barros, B. Kuhnen, M. da C. Serra e C. M. da S. Fernandes, Ciências forenses: princípios éticos e vieses, *Rev. Bioét.*, 2021, **29**, 55–65.
- 2 V. Z. dos Santos, dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2024.
- 3 Técnicas e Importância da Perícia Documental, <https://www.jusbrasil.com.br/artigos/tecnicas-e-importancia-da-pericia-documental/2269755874>, (acessado em 7 de Janeiro, 2026).
- 4 F. E. D. S. Vasconcelos, *O Alferes*, 1988, **6**, 15–43.
- 5 A. C. F. Braz, J. M. O. B. Brandão, N. A. dos Santos, M. H. C. Nascimento, B. M. M. Siqueira, P. R. Filgueiras e W. Romão, ESTUDO DA AUTENTICIDADE DE CÉDULAS DE CEM REAIS POR ESPECTROSCOPIA NA REGIÃO DO INFRATERMELHO MÉDIO E PRÓXIMO ASSOCIADA A MÉTODOS QUIMIOMÉTRICOS, *Quim. Nova*, 2025, **48**, 1–10.
- 6 Estatística de Falsificação, <https://www.bcb.gov.br/estatisticas/mecirestfalsas?ano=2025>, (acessado em 7 de Janeiro, 2026).
- 7 Segunda família do real, <https://www.bcb.gov.br/cedulasemoedas/segundafamilia>, (acessado em 7 de Janeiro, 2026).
- 8 T. A. de Oliveira, dissertação de Mestrado, Universidade de Brasília, 2020.
- 9 L. A. Colnago e T. de C. Bicudo, A Espectroscopia na região do Infravermelho e algumas aplicações, *Documentos*, 2010, **51**.
- 10 M. M. C. Ferreira, A. M. Antunes, M. S. Melgo and P. L. O. Volpe, Quimiometria I: calibração multivariada, um tutorial, *Quím. Nova*, 1999, **22**, 724–731.
- 11 L. C. Lee, C.-Y. Liong e A. A. Jemain, Partial least squares-discriminant analysis (PLS-DA) for classification of high-dimensional (HD) data: a review of contemporary practice strategies and knowledge gaps, *Analyst*, 2018, **143**, 3526–3539.

# Uso de nanopolímero magnético a base de carbono para adsorção de metais pesados em águas contaminadas

DOI: 10.5281/zenodo.18462218

Victoria Pires da Silva <sup>a\*</sup>

The contamination of water bodies by heavy metals constitutes a serious environmental and public health problem, intensified by industrial activities, mining, and other anthropogenic sources. Metals such as lead, cadmium, and zinc stand out due to their high toxicity, bioaccumulation potential, and adverse effects on aquatic ecosystems and human health. In this context, adsorption emerges as an efficient, sustainable, and low-energy-cost alternative for the treatment of contaminated water. This work discusses the experimental study conducted by Shoulian Wei et al., which investigates the synthesis and application of the magnetic nanopolymer  $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{C}/\text{PM}$  as an adsorbent for the removal of metal ions in aqueous media. Parameters such as solution pH, adsorbent concentration, initial metal concentration, as well as selectivity, adsorption kinetics, and material reusability were evaluated. The results demonstrate high removal efficiency for  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$ , and  $\text{Pb}^{2+}$ , particularly under near-neutral conditions, along with good stability and reuse potential, indicating its applicability in the treatment of wastewater and contaminated waters.

A contaminação de corpos hídricos por metais pesados constitui um grave problema ambiental e de saúde pública, intensificado por atividades industriais, mineração e outras fontes antrópicas. Metais como chumbo, cádmio e zinco destacam-se pela elevada toxicidade, potencial de bioacumulação e pelos efeitos adversos aos ecossistemas aquáticos e à saúde humana. Nesse contexto, a adsorção surge como uma alternativa eficiente, sustentável e de baixo custo energético para o tratamento de águas contaminadas. Este trabalho discute o estudo experimental conduzido por Shoulian Wei et al., que investiga a síntese e a aplicação do nanopolímero magnético  $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{C}/\text{PM}$  como adsorvente para a remoção de íons metálicos em meio aquoso. Foram analisados parâmetros como pH da solução, concentração do adsorvente, concentração inicial dos metais, além de uma análise da seletividade, da cinética de adsorção e da reutilização do material. Os resultados demonstram elevada eficiência na remoção de  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$  e  $\text{Pb}^{2+}$ , especialmente em condições próximas à neutralidade, além de boa estabilidade e potencial de reutilização, indicando sua potencial aplicabilidade no tratamento de efluentes e águas contaminadas.

<sup>a</sup>Universidade de Brasília (UnB). Campus Darcy Ribeiro. Instituto de Química (IQ/UnB).

\*E-mail: vickiprs@gmail.com

**Palavras-chave:** Adsorção; nanopolímero; metais pesados.

Aceito em 11 de janeiro de 2025,  
Aprovado em 30 de janeiro de 2025,  
Publicado em 03 de fevereiro de 2025.

## Introdução

Dois grandes crimes ambientais marcaram a história recente do Brasil e evidenciam os impactos da contaminação por metais pesados em corpos hídricos: o rompimento da barragem de Fundão, em Mariana (2015), e da barragem da Mina Córrego do Feijão, em Brumadinho (2019), ambos em Minas Gerais. As consequências dessas tragédias persistem até os dias atuais, em razão da contaminação do solo, dos rios e das bacias hidrográficas.<sup>1,2</sup> Dados do Programa de Monitoramento da Biodiversidade Aquática indicam que, no caso de Mariana, os rejeitos atingiram o Rio Doce e seus afluentes, alcançando o Oceano Atlântico, resultando em aumentos significativos nas concentrações de metais pesados, tanto nas águas quanto nos organismos vivos desses ambientes.<sup>3</sup> Apesar de esses eventos estarem associados a crimes ambientais específicos, a

contaminação de corpos hídricos por metais pesados constitui uma preocupação recorrente na sociedade contemporânea, decorrente não apenas da mineração, mas também de diferentes atividades industriais e antrópicas.

Com base no artigo de revisão sistemática feito por Motta *et al.*, intitulado “*Heavy Metal Water Contamination: Anthropogenic Sources and Environmental and Public Health Implications*”, concluiu-se que, alguns dos metais mais comumente identificados em águas contaminadas estão o cádmio (Cd), chumbo (Pb) e zinco (Zn). Todos os três metais citados estão relacionados a atividades industriais e de mineração. Já os dois primeiros, Cd e Pb, estão associados também às indústrias químicas e petroquímicas, ao uso de fertilizantes e pesticidas, ao descarte inadequado de baterias, fluidos automotivos e resíduos de combustíveis, águas residuais e efluentes industriais sem tratamento adequado e

outros. Entre os diversos problemas de saúde associados à presença desses metais pesados em corpos hídricos, uma grande preocupação global está relacionada à bioacumulação na cadeia alimentar, afetando não apenas o ecossistema aquático, mas também o próprio ser humano, em razão do consumo de águas não devidamente tratadas e de organismos contaminados.<sup>4</sup>

No ambiente aquático, o chumbo é tóxico para organismos como peixes e aves e pode se acumular na cadeia alimentar, ampliando seus impactos sobre a saúde humana. Em humanos, a exposição a esse metal está associada a doenças cardiovasculares, anemia, danos aos sistemas nervoso, hematológico, renal e cardiovascular, além de prejuízos cognitivos, transtornos mentais, infertilidade, malformações e efeitos mutagênicos e carcinogênicos.<sup>5</sup>

O cádmio é um metal pesado de alta toxicidade. Em ambientes aquáticos, compromete o crescimento e o desenvolvimento de peixes e plantas e pode se bioacumular ao longo da cadeia alimentar, ampliando os riscos à saúde humana. Classificado como carcinogênico, esse metal está associado a nefropatia irreversível, causando também danos aos rins, fígado, esqueleto e sistema cardiovascular, bem como perdas auditivas e visuais. Além disso, apresenta efeitos teratogênicos e mutagênicos, atua como desregulador endócrino e interfere na reprodução humana. Sua exposição também pode acelerar o surgimento de doenças articulares.<sup>5</sup>

O zinco é um elemento essencial presente em diversos ecossistemas; entretanto, em concentrações elevadas, pode causar impactos negativos. Em ambientes aquáticos, seu excesso pode alterar o pH da água, além de provocar efeitos bioquímicos e fisiológicos nos organismos e sofrer bioacumulação, afetando a saúde humana. A exposição excessiva ao zinco está associada a danos aos órgãos, perda do olfato, fadiga, alterações neurológicas, efeitos mutagênicos e distúrbios urinários.<sup>5</sup>

Devido aos elevados impactos prejudiciais aos ecossistemas hídricos e à saúde humana, diversos métodos de tratamento foram desenvolvidos para a redução da concentração de metais pesados na água. Entre esses métodos, destacam-se aqueles que utilizam a adsorção, técnica na qual os metais pesados presentes na água são retidos na superfície e nos poros do material adsorvente, promovendo sua separação do meio aquoso.<sup>6</sup> Em comparação com outras abordagens, esse método se destaca por sua operação

simplificada, elevada eficiência de remoção, menor custo de energia, caráter sustentável e ampla capacidade de adaptação a diferentes sistemas. Dentre os materiais adsorventes que têm sido foco de pesquisas recentes, destacam-se aqueles à base de carbono, em especial os nanomateriais, os quais apresentam elevada eficácia, alta porosidade e grande área superficial, além da presença de sítios ativos associados a grupos funcionais. Uma alternativa de grande potencial para o tratamento de águas contendo metais pesados por meio da adsorção é a integração entre nanotecnologia e materiais magnéticos por meio de nanopolímeros magnéticos à base de carbono.<sup>7,8</sup>

Shoulian Wei *et al.*, no artigo '*Magnetic Carbon Porous Polymer Prepared from a New Suspended Emulsion for the Absorption of Heavy Metal Ions*', estudam a síntese de um nanopolímero de carbono magnético obtido por polimerização em suspensão e sua aplicação direcionada à adsorção de íons metálicos em meio aquoso. O estudo tem como foco a obtenção de informações sobre o potencial uso desse nanopolímero na captura de metais pesados em efluentes e águas contaminadas.<sup>8</sup>

## Metodologia

No artigo de referência, Shoulian Wei *et al.* obtém um nanopolímero de carbono magnético por meio da técnica de polimerização em suspensão. O processo foi iniciado com a formulação de nanossuspensões de carbono magnético, empregando dois bastões de carbono submetidos à limpeza ultrassônica e dispersos em meio aquoso contendo tampão e com pH neutro. A aplicação de eletrólise assistida por ultrassom possibilitou a formação de uma nanossolução de nanopartículas de carbono distribuídas uniformemente. Em seguida, realizou-se a síntese das nanopartículas magnetizáveis ( $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{C}$ ), a partir da adição de sais de ferro à suspensão de carbono, com ajuste para pH alcalino e manutenção em banho-maria sob agitação. Os sólidos formados foram recuperados por separação magnética, lavados e secos a vácuo. Por fim, obteve-se o composto polimérico ( $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{C@PM}$ ), adicionando-se à fase aquosa surfactante, coestabilizador e iniciador de polimerização, seguida da incorporação da fase oleosa. A suspensão foi submetida a banho de óleo a 85 °C por 16 horas para a ocorrência da polimerização. O material final foi então isolado, triturado, submetido a lavagens e purificado por extração em Soxhlet, sendo posteriormente seco a vácuo para obtenção do nanopolímero.

Após a síntese do nanopolímero  $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{C}@\text{PM}$ , foram realizados ensaios para caracterizar e comparar sua eficiência com a das nanopartículas  $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{C}$  na remoção dos íons metálicos  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$  e  $\text{Ni}^{2+}$ . Os experimentos foram conduzidos sob agitação controlada com posterior separação magnética, e as concentrações residuais dos metais foram determinadas por espectrometria de absorção atômica em chamas. Em seguida, avaliou-se o desempenho adsorptivo de ambos os materiais especificamente para  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$  e  $\text{Pb}^{2+}$ , investigando parâmetros como pH, tempo de contato e concentração inicial. A estabilidade e a possibilidade de reutilização do adsorvente também foram analisadas por meio de ciclos de adsorção e dessorção.

No presente artigo, foi realizada uma revisão bibliográfica abrangente para explorar estudos relativos às aplicações de adsorventes, em especial nanopolímeros, no tratamento de efluentes e águas contaminadas com metais pesados. A metodologia envolveu a utilização das palavras-chave “*Heavy metals*”, “*water treatment*”, “*polymer*” e “*adsorbent*”. A busca foi conduzida em diversas plataformas e bases de dados, incluindo o Periódicos CAPES, por meio do acesso CAFE, além das bases Elsevier e Science Direct. Foram selecionados livros e artigos relevantes sobre o tema. A análise contemplou revisões sistemáticas e um estudo experimental de referência, visando proporcionar uma visão ampla e aprofundada sobre o assunto. Também foram adotados critérios de inclusão e exclusão para filtrar trabalhos que não atendiam aos padrões de qualidade ou relevância para o assunto.

## Resultados e discussão

A adsorção é um fenômeno de transferência de massa interfacial que ocorre entre um meio aquoso e um material sólido adsorvente, possibilitando a separação de substâncias presentes na solução por meio de interações específicas com a superfície do adsorvato, dividindo-se, de acordo com a força dessas interações, em adsorção física e adsorção química. Para caracterizar adequadamente os mecanismos associados ao processo, empregam-se relações empíricas e isotermas de adsorção com base no equilíbrio, ferramentas que permitem determinar propriedades como a capacidade máxima de adsorção, além do seu estado e sua força de interação. Entretanto, em sistemas contendo metais pesados, a eficiência de adsorção é diretamente afetada por múltiplos fatores devido às interações entre os íons metálicos e o adsorvente, além de suas concentrações.<sup>8</sup> Esse equilíbrio de adsorção utilizado para caracterização do processo é

influenciado por propriedades do meio, tais como o valor de pH, temperatura, concentração inicial de metais pesados, presença de diferentes íons metálicos e quantidade de adsorvente utilizada.<sup>8</sup>

Shoulian Wei *et al.*, em sua pesquisa, fez a análise da adsorção dos íons metálicos  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$  e  $\text{Pb}^{2+}$  utilizando o  $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{C}@\text{PM}$  como adsorvente, foram avaliadas a influência do pH, a variação da concentração do adsorvente e a concentração inicial de metais pesados na eficiência do processo. Ademais, foram realizadas análises da seletividade e da cinética de adsorção, além da avaliação da dessorção e da reutilização do material adsorvente.<sup>7</sup>

### Influência do pH do meio na adsorção

Um dos parâmetros essenciais no estudo da adsorção de metais pesados é o pH da solução, que indica se o meio é ácido, básico ou neutro, influenciando diretamente o mecanismo de adsorção, a eficiência do processo e a afinidade do adsorvente por determinados íons metálicos. Isso ocorre porque, dependendo da acidez ou alcalinidade do meio, podem ocorrer alterações na carga da superfície do adsorvente, o que afeta o comportamento dos íons metálicos e a dissociação dos grupos funcionais. Dessa forma, uma superfície com carga mais positiva ou mais negativa tende a atrair, respectivamente, ânions ou cátions, apresentando maior afinidade por íons metálicos específicos e interagindo com diferentes grupos funcionais.<sup>8</sup>

No artigo de referência, foi testada a efetividade do nanopolímero magnético em uma faixa de pH entre 2 e 7, correspondente a meios mais ácidos até os próximos a neutralidade. Observou-se que o pH com maior eficiência de adsorção de metais, de modo geral, foi pH 6, especialmente para os íons zinco e chumbo, enquanto o cádmio apresentou aumento da adsorção do pH 6 para o pH 7. Para o chumbo e o zinco, o aumento do pH acima de 6 favorece a formação de compostos insolúveis, o que dificulta a adsorção desses íons pelo adsorvente. Por outro lado, em valores de pH mais baixos, mais ácidos, os grupos funcionais do adsorvente tornam-se mais protonados, o que reduz a interação com os íons metálicos e, conseqüentemente, a eficiência de adsorção.<sup>7</sup>

### Influência da concentração de adsorvente na adsorção

Outro ponto de atenção na adsorção de metais pesados por adsorventes à base de carbono é a concentração do adsorvente. De modo geral, o aumento da concentração do

adsorvente proporciona um maior número de sítios ativos disponíveis para a adsorção, elevando a eficiência do processo até determinado limite.<sup>8</sup> A partir desse ponto, pode ocorrer o empilhamento ou a aglomeração das partículas, o que reduz o acesso aos sítios ativos e dificulta o contato com os íons metálicos, prejudicando a adsorção. Esse comportamento também foi observado por Shoulian Wei *et al.* nos testes de adsorção realizados com variação da massa do adsorvente entre 5 e 30 mg. Conforme esperado teoricamente, houve um aumento significativo da adsorção até 10 mg. Já entre 10 e 15 mg, o aumento tornou-se menos pronunciado e, a partir de 15 mg, observou-se um ponto limite, no qual esse aumento na eficiência não era significativo.<sup>7</sup>

#### **Influência da concentração de metais pesados na adsorção**

A influência da concentração de metais pesados na adsorção segue uma lógica semelhante à da concentração do adsorvente. De modo geral, o aumento da concentração de metais pesados favorece a transferência de massa para a superfície do adsorvente, elevando a eficiência do processo até determinado limite. A partir desse ponto, a elevada concentração de íons metálicos passa a dificultar essa transferência, uma vez que os sítios ativos do adsorvente se encontram saturados, reduzindo a capacidade de adsorção.<sup>8</sup> Na avaliação da influência da concentração inicial de metais pesados na adsorção utilizando  $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{C}@\text{PM}$ , mantendo-se constantes as concentrações de chumbo e cádmio, a concentração de zinco foi aumentada em três etapas: de 50 a 200  $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$ , de 200 a 500  $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$  e até 600  $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$ , avaliando-se a eficiência do processo. Nos dois primeiros intervalos, observou-se que a quantidade de metais ainda não era suficiente para atingir o limite máximo de adsorção, embora tenha ocorrido um aumento significativo na captura de zinco e um aumento mais gradual para cádmio e chumbo. Já no último intervalo, atingiu-se o valor máximo de absorvância, evidenciando a ocupação efetiva dos sítios ativos do adsorvente.<sup>7</sup>

#### **Seletividade, Cinética e Reutilização**

O estudo do processo de adsorção e de sua seletividade frente à presença de diferentes íons metálicos em um mesmo meio é essencial, uma vez que águas contaminadas por atividades industriais e outras fontes geralmente apresentam múltiplos contaminantes. Em relação ao polímero e à partícula de  $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{C}$ , em um meio contendo zinco, cádmio e chumbo, observou-se maior efetividade na adsorção utilizando o nanopolímero magnético. Esse comportamento pode ser explicado pela maior interação entre

o material e os íons metálicos, decorrente da maior quantidade de grupos funcionais e de sítios ativos disponíveis em sua superfície.<sup>7</sup> Foi realizada a análise da cinética de adsorção e observou-se que o equilíbrio do processo foi atingido após 20 minutos. Dessa forma, foram conduzidos seis ciclos de adsorção com o objetivo de avaliar a possibilidade de reutilização do adsorvente. Observou-se uma redução mínima na eficiência de adsorção ao longo dos ciclos, o que corrobora a viabilidade do reuso efetivo do material.

## **Conclusões**

A partir da análise realizada, verifica-se que a adsorção utilizando nanopolímeros magnéticos à base de carbono constitui uma estratégia promissora para o tratamento de águas contaminadas por metais pesados. O estudo de Shoulian Wei *et al.* demonstrou que o nanopolímero  $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{C}@\text{PM}$  apresenta desempenho superior em relação às nanopartículas  $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{C}$ , resultado da maior disponibilidade de sítios ativos e da presença de grupos funcionais capazes de interagir eficientemente com os íons metálicos. Observou-se que parâmetros como pH, concentração do adsorvente e concentração inicial dos metais exercem influência direta sobre a eficiência do processo adsorptivo, sendo o pH próximo à neutralidade o mais favorável. Além disso, o material apresentou rápida cinética de adsorção, atingindo o equilíbrio em curto intervalo de tempo, e manteve alta eficiência após sucessivos ciclos de reutilização, evidenciando sua estabilidade e viabilidade prática de reutilização. Dessa forma, os resultados reforçam o potencial dos nanopolímeros magnéticos como alternativas eficazes, sustentáveis e economicamente viáveis para a mitigação da contaminação por metais pesados em ambientes aquáticos.

## **Contribuições por Autor**

A escrita do presente artigo e a revisão bibliográfica feita são de Victoria Pires da Silva.

## **Conflito de interesse**

Não há conflito de interesses.

## **Agradecimentos**

Agradeço ao PET-Química/IQ/UnB, à Secretaria de Educação Superior do Ministério da Educação (SeSU/MEC) e ao Decanato de Ensino de Graduação (DEG/UnB) por todo o apoio concedido através do Programa de Educação Tutorial.



Ao Instituto de Química (IQ/UnB) e à Universidade de Brasília pelo suporte e espaço fornecidos.

- 8 X. Chen, M. F. Hossain, C. Duan, J. Lu, Y. F. Tsang, M. S. Islam and Y. Zhou, Isotherm models for adsorption of heavy metals from water - A review, *Chemosphere*, 2022, **307**, 135545.

## Notas e referências

- 1 Após 9 anos, metais do desastre de Mariana chegam às baleias no litoral; ‘desastre continua acontecendo’, diz pesquisador, <https://g1.globo.com/es/espírito-santo/norte-noroeste-es/noticia/2024/09/11/apos-9-anos-metais-do-desastre-de-mariana-chegam-as-baleias-no-litoral-desastre-continua-acontecendo-diz-pesquisador.ghhtml>, (accessed 10 January 2026).
- 2 Brumadinho, <https://www.cnnbrasil.com.br/nacional/sudeste/mg/brumadinho-fiocruz-detecta-aumento-de-metais-em-urina-de-criancas/>, (accessed 10 January 2026).
- 3 A. Bianchini, A. Cardoso Bastos, E. Costa Teixeira, E. V. de Castro and J. Abdala Dergam dos Santos, RELATÓRIO ANUAL: Integração da Biodiversidade do Ambiente Dulcícola, Fundação Espírito-santense de Tecnologia, Vitória, 2019.
- 4 A. L. L. Motta, N. L. Motta, D. D. S. Sales, C. M. R. Sales, C. H. Nunes and R. D. S. Viana, Heavy Metal Water Contamination: Anthropogenic Sources and Environmental and Public Health Implications, *RGSA*, 2025, **19**, e012300.
- 5 P. Saravanan, V. Saravanan, R. Rajeshkannan, G. Arnica, M. Rajasimman, G. Baskar and A. Pugazhendhi, Comprehensive review on toxic heavy metals in the aquatic system: sources, identification, treatment strategies, and health risk assessment, *Environmental Research*, 2024, **258**, 119440.
- 6 Adsorption - an overview | ScienceDirect Topics, <https://www.sciencedirect.com/topics/materials-science/adsorption>, (accessed 10 January 2026).
- 7 S. Wei, S. Huang, J. Zhou, C. Xiao, J. Cao, J. Xiao and C. Xie, Magnetic Carbon Porous Polymer Prepared from a New Suspended Emulsion for the Absorption of Heavy Metal Ions, *Polymers*, 2025, **17**, 257.



# Waterless Cosmetics: a nova tendência sustentável dos cosméticos

DOI: 10.5281/zenodo.18463209

Larissa Cavalcante Antunes<sup>a\*</sup>

Water is a limited resource, and its use has raised concerns regarding the future of sustainability. In this context, initiatives such as the “waterless” cosmetics trend have been growing, aiming to significantly reduce or eliminate the use of free water in cosmetic formulations, thereby promoting a lower environmental impact. Within this framework, the present article aims to further explore this topic and to evaluate the formulation of different waterless exfoliating bars by assessing physicochemical and sensory parameters within this emerging trend.

A água é um recurso limitado e sua utilização tem causado preocupações relacionadas ao futuro da sustentabilidade. Diante disto, vêm crescendo iniciativas como a tendência de cosméticos “Waterless”, que visa reduzir significativamente ou eliminar o uso de água livre em formulações cosméticas, promovendo menor impacto ambiental. Neste contexto, o presente artigo tem como objetivo explicitar mais sobre a temática e avaliar a formulação de diferentes barras esfoliantes “waterless”, verificando parâmetros físico-químicos e sensoriais dentro dessa nova tendência.

<sup>a</sup>Universidade de Brasília (UnB). Campus Darcy Ribeiro. Instituto de Química (IQ/UnB).

\*E-mail: larissa.c.antunes@gmail.com

**Palavras-chave:** Waterless cosmetics; esfoliante; sustentabilidade.

Recebido em 11 de janeiro de 2026,

Aprovado em 30 de janeiro de 2026,

Publicado em 03 de fevereiro de 2026.

## Introdução

Na produção da maioria dos cosméticos o ingrediente mais utilizado é a água e isto pode ser observado ao verificar que normalmente o primeiro nome na composição de um cosmético, que de acordo com a *International Nomenclature of Cosmetic Ingredients (INCI)* os ingredientes devem ser listados em ordem de maior concentração dentro do produto, é o nome “Aqua” que se refere a presença de água.<sup>1</sup>

Um dos maiores papéis da água dentro da formulação de cosméticos é a sua atuação como solvente de matérias-primas, facilitando a sua dispersão. Além disso ela também atua como veículo para os ingredientes ativos, além de permitir a diluição desses princípios ativos.<sup>1</sup> A água dentro da formulação pode contribuir para a viscosidade, textura e outras propriedades desejáveis dentro do produto, como a rápida absorção e espalhabilidade.<sup>1,2</sup> Devido a todas essas características, do baixo valor e da acessibilidade, a água sempre foi muito empregada nas indústrias cosméticas, entretanto, este recurso não é ilimitado e a sua utilização excessiva vem causando preocupações em relação a sustentabilidade do planeta.<sup>1,3,4</sup>

A escassez de água potável é uma grande problemática que a humanidade atualmente enfrenta. Com o

aumento da conscientização e da preocupação com as questões ambientais pela população, têm se popularizado movimentos que visam o menor uso de água ao longo do ciclo de vida dos produtos, desde a aquisição de matérias primas até o uso posterior pelos consumidores. Desta forma, inicia-se uma nova tendência global, a tendência “Waterless”, que vêm crescendo no mercado cosmético, que visa a formulação de produtos com baixo ou nenhum teor de água.<sup>1,3,4</sup>

Os Cosméticos “Waterless” podem incluir cosméticos anidros ou formulações mais concentradas e de maneira geral utilizam menos embalagem e conservantes possuindo um impacto positivo no meio ambiente.<sup>3</sup> Nos cosméticos anidros, a água é substituída por outros ingredientes como óleos vegetais, ceras, manteigas, extratos naturais, silicones, pós ou ativos lipossolúveis. Esses ingredientes podem proporcionar uma maior hidratação, nutrição e proteção devido às suas propriedades, o que fornece também maior estabilidade e durabilidade aos produtos.<sup>4,5,6</sup>

Devido à menor atividade de água na sua composição os produtos se tornam menos propícios à contaminação por microrganismos, como fungos e bactérias.<sup>5,6</sup> Além disso, por serem, de maneira geral, mais concentrados as embalagens são mais compactas e com menor necessidade de acondicionamentos, além de facilitar o

transporte, seja pelo próprio consumidor como pela logística industrial. Um exemplo do uso desta vantagem é no próprio contexto social, há estudos que visam utilizar os cosméticos “waterless” no campo da saúde pública da população em situação de rua ou que sofrem com a falta de água, fornecendo e otimizando a higiene diária dessas pessoas.<sup>7,8</sup>

Desta forma, diversos pesquisadores no ramo de cosmetologia, marcas referências em cosméticos, micro empreendedores, bem como setores da gestão pública estão pesquisando e favorecendo a produção de cosméticos “waterless”, os quais possuem diversas vantagens para a sustentabilidade, mas que também trazem certos desafios na estabilidade e segurança das formulações, bem como na aceitabilidade dos consumidores. Diante disso, o presente QuiArtigo visa revisar e avaliar o trabalho de Ogorzałek e colaboradores<sup>4</sup> na formulação de uma barra esfoliante com pouco teor de água, que segue a tendência *waterless*.

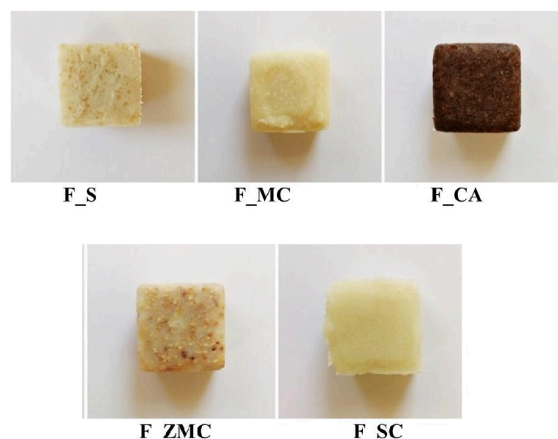
## Metodologia

Para o desenvolvimento deste artigo, realizou-se uma busca bibliográfica específica em periódicos como Periódicos CAPES e Web of Science, utilizando as palavras-chaves “waterless cosmetics” e “anhydrous cosmetics”, “formulação de cosméticos”, “cosméticos com pouca água”, “cosméticos formulados sem água” e ano de publicação de 2019 até 2025.

A metodologia aplicada por Ogorzałek e colaboradores<sup>4</sup> utilizou 13 matérias primas para a produção de uma série de barras esfoliantes (*scrub bars*), sendo elas: manteiga de karité, palmitato de sódio e palmiste de sódio; sacarose; celulose microcristalina; pó de semente de *Coffea arabica*; grânulos de sabugo de milho; cloreto de sódio; cera de candelila; lanolina; glicerina; óleo de semente de uva e manteiga de semente de manga. As barras foram fazendo variações entre os tipos de esfoliantes utilizados: sacarose (F\_S), celulose microcristalina (F\_MC), pó de semente de café arábico (F\_CA), grânulos de sabugo de milho (F\_ZMC) e cloreto de sódio (F\_SC).<sup>4</sup>

Quantidades previamente determinadas de palmitato de sódio e palmiste de sódio e de cera de candelila foram maceradas e, posteriormente, aquecidas em banho-maria até completa dissolução. Em seguida, adicionaram-se lanolina, glicerina, manteiga de semente de manga e óleo de semente de uva. Após a formação de uma mistura uniforme, os esfoliantes foram colocados em moldes até a solidificação completa (Figura 1).<sup>4</sup>

**Figura 1.** Esfoliantes produzidos Extraído da referência 4.



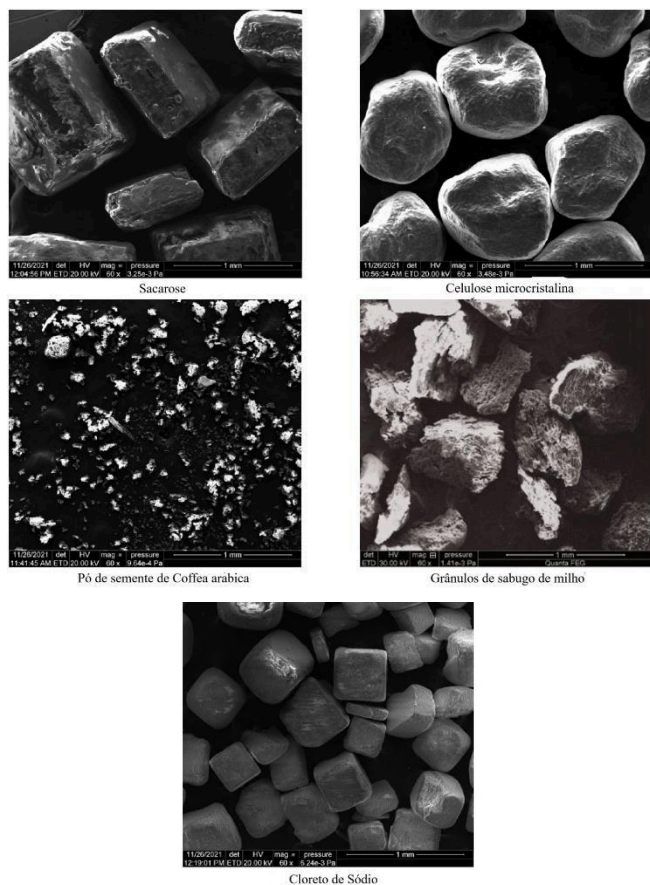
As formulações desenvolvidas foram submetidas a testes para verificação de suas propriedades físico-químicas, através da Microscopia eletrônica de Varredura dos Agentes esfoliantes (MEV) por meio de um microscópio para verificar as propriedades morfológicas, análise de textura por meio de um analisador de textura *Brookfield CT3*, que compõe também os parâmetros de dureza e força adesiva por meio do software *Texture ProCT* e avaliação de cor por meio de um colorímetro. Também foram realizados testes sensoriais dos produtos por consumidores, considerando três categorias: durante o uso, após o uso e avaliação em mãos.

## Resultados e discussão

### Microscopia eletrônica de Varredura dos Agentes esfoliantes (MEV)

Ao analisar as partículas dos esfoliantes, verificou-se que todos apresentaram diferenças quanto ao tamanho, regularidade e formato. A sacarose e cloreto de sódio mostraram partículas em formato mais regulares com aparência de cubos. A celulose microcristalina também apresentou um formato regular, mas com partículas esféricas e bem arredondadas, já o pó de *Coffea arabica* (café arábico) e o grânulos de milho mostraram formas mais irregulares. De acordo com estudos<sup>9,10</sup> as sementes de frutas moídas tendem a proporcionar uma esfoliação mais abrasiva, enquanto partículas mais esféricas e lisa promovem uma esfoliação suave. Entretanto, deve-se ter cuidado, visto que esfoliações mais abrasivas podem causar irritação à pele.

**Figura 2.** Imagem dos agentes esfoliantes pelo microscópio.  
Extraído da referência 4.



### Análise de textura

Os maiores valores de dureza e força adesiva foram observados, respectivamente, nas formulações F\_CA e F\_SC, que continham pó de semente de café arábico e cloreto de sódio, sendo as duas partículas de tamanhos menores. Valores semelhantes de dureza, variando entre 611 g e 647 g, foram obtidos para as formulações F\_S e F\_ZMC. Já o menor valor de dureza, 522,5 g, foi observado na formulação contendo celulose microcristalina (F\_MC), o único esfoliante com partículas de formato esférico entre os compostos analisados. As formulações contendo grânulos de sabugo de milho (F\_ZMC), com força adesiva de 112,8 g, e sacarose (F\_S), com 116 g, apresentaram os menores valores de força adesiva.

### Avaliação de cor

A cor é um dos parâmetros de qualidade de um cosmético, ao realizar o monitoramento de cor é possível verificar se há alteração de coloração durante o

armazenamento. Normalmente este acompanhamento pode ser realizado a partir de um estudo de estabilidade, no qual expõe uma amostra do produto em diferentes circunstâncias climáticas e de temperatura, como por exemplo armazenado diante da luz solar, refrigerador ou câmara climática. Além disso, esse estudo de cor é essencial para atender às preferências do mercado consumidor e dos padrões de qualidade do produto.

Tendo como base os resultados para o parâmetro da luz refletida, foi possível averiguar que o esfoliante que possui a coloração mais clara é a celulose microcristalina e a mais escura a formulação com o pó de café. Observando o parâmetro de variação de coloração azul e amarelo, todas as barras esfoliantes possuíram predominância da tonalidade amarela.

### Avaliação Sensorial pelo consumidor

Os resultados da avaliação mostraram que os esfoliantes que obtiveram maior aceitabilidade pelo público em ordem decrescente foi o esfoliante com pó de café (102 pontos de aceitabilidade de 130 pontos), grânulos de milho (100/130), celulose microcristalina (99/130), sacarose (95/130) e cloreto de sódio (89/130). Os avaliadores observaram esfoliação visível ao utilizar o esfoliante contendo celulose microcristalina, além de avaliarem positivamente sua textura e efeito hidratante. Em relação a coloração e fragrância o esfoliante de pó de café recebeu as maiores pontuações.

## Conclusões

Diante dos impactos ambientais e das mudanças climáticas em todo o planeta, o desenvolvimento sustentável está se tornando uma preocupação crescente nos setores industriais, como a indústria cosmética. Para tentar minimizar esses impactos vêm crescendo a tendência de formulações e uso de cosméticos “waterless”. A partir do artigo avaliado<sup>4</sup> pode se concluir que é possível criar produtos como as barras esfoliantes com o mínimo de água. Todas os esfoliantes formulados se configuraram como uma alternativa viável, de baixo custo e sustentável. Entretanto, cabe se destacar a importância da avaliação de parâmetros sensoriais como coloração e fragrância que foram determinantes para a escolha do esfoliante a base de pó de café e do parâmetro de dureza, visto que o esfoliante com a menor dureza, formulado com celulose microcristalina se mostrou o melhor em relação a textura e desenvolvimento esfoliante durante o uso.

Por fim, o presente artigo demonstra um tópico relevante para o desenvolvimento sustentável e uma mudança crescente no mercado cosmético atual, o qual visa minimizar os impactos no meio ambiente, mas trazendo produtos que seguem todos os padrões de qualidade exigidos.

## Contribuições por Autor

O artigo, a revisão de referências e a inclusão de algumas observações são de Larissa Cavalcante Antunes.

## Conflito de interesse

Não há conflito de interesses.

## Agradecimentos

Agradeço ao grupo PET-Química/IQ/UnB, à Secretaria de Educação Superior do Ministério da Educação (SeSU/MEC) e ao Decanato de Ensino de Graduação (DEG/UnB) pelo apoio ao Programa de Educação Tutorial pela oportunidade concedida. Ao Instituto de Química (IQ/UnB) e à Universidade de Brasília pelo suporte e espaços fornecidos.

## Notas e referências

- 1 J. B. Aguiar, A. M. Martins, C. Almeida, H. M. Ribeiro, J. Marto, Water sustainability: A waterless life cycle for cosmetic products, *Sustainable Production and Consumption*, 2022, **32**, 35-51.
- 2 V. S. Lopes, Cosméticos formulados com pouca ou nenhuma água, Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Química Industrial) – Universidade Federal de Uberlândia, 2024.
- 3 M. Lukić, D. Krajišnik, Challenges and advances in waterless cosmetic product development – raising awareness of water Sustainability, *Archives of Pharmacy*, 2024, **74**.
- 4 M. Ogorzałek, E. Klimaszewska, A. Małysa, D. Czerwonka, R. Tomasiuk, Research on Waterless Cosmetics in the Form of Scrub Bars Based on Natural Exfoliants, *Applied Sciences*. 2024, **14**, 11329.
- 5 I. B. Oliveira, Cosméticos anidros e desafios da sustentabilidade brasileira: uma revisão de literatura., Trabalho de conclusão de curso (Bacharelado em Farmácia) — Universidade de Brasília, 2023.
- 6 K. Dobos, Formulating on Trend: Waterless Cosmetics. *Cosmetics&Toiletries*, 2019, 1.
- 7 M. Desai, D. Agrawal, The Vanishing Blue Gold: An Old Problem, a New Technology and a Big Idea—Clensta International, *Socio-Tech Innovation: Harnessing Technology for Social Good*, 2020, 4, 51-71.
- 8 L. Rollinger, Health, hygiene, and practical interventions, for people who are experiencing homelessness. *Boston University of Medicine*, 2020, 89.
- 9 Z. D. Draelos, Astringents, masks, and ancillary skin care products, *Textbook of Cosmetic Dermatology*, 2017, 190–193.
- 10 J. A. B. Gonçalves, G. O. Pinheiro, F. R. V. Diaz, Study of the Shape and Angularity of Abrasive Particles, Vegetable and Mineral, to be Incorporated into Solid Soap with Exfoliating Action: Kaolin, Bentonite, Rice Microspheres, Bamboo and Apricot Seed, Seven Editora, São José dos Pinhais, Brazil, 2023.



 [protocolosemquimica@gmail.com](mailto:protocolosemquimica@gmail.com)

 [@protocolosemquimica](https://www.instagram.com/protocolosemquimica)

 <https://protocolosemquimica.com/>

O grupo PET-Química/IQ/UnB agradece à Secretaria de Educação Superior do Ministério da Educação (SeSU/MEC) e ao Decanato de Ensino de Graduação (DEG/UnB) por todo o apoio concedido através do Programa de Educação Tutorial.

