

UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO
ESCOLA DE FARMÁCIA

ANA LUÍSA DE SOUZA HENRIQUES

Validação do ensaio de imobilização aguda de *Daphnia magna* com dicromato de potássio e construção de um banco de dados para avaliação de contaminantes emergentes

Ouro Preto
2026

ANA LUÍSA DE SOUZA HENRIQUES

Validação do ensaio de imobilização aguda de *Daphnia magna* com dicromato de potássio e construção de um banco de dados para avaliação de contaminantes emergentes

Monografia apresentada ao curso de Farmácia da Universidade Federal de Ouro Preto como requisito parcial para obtenção do título de Bacharel em Farmácia.

Orientador(a): Prof.^a Dra. Maria Elvira Poleti Martucci

Ouro Preto
2026



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO
REITORIA
ESCOLA DE FARMÁCIA
DEPARTAMENTO DE FARMÁCIA



FOLHA DE APROVAÇÃO

Ana Luísa de Souza Henriques

**Validação do ensaio de imobilização aguda de *Daphnia magna* com
dicromato de potássio e construção de um banco de dados para avaliação de
contaminantes emergentes**

Monografia apresentada ao Curso de Farmácia da Universidade Federal
de Ouro Preto como requisito parcial para obtenção do título de Farmacêutico Generalista,

Aprovada em 04 de março de 2026

Membros da banca

Dra Maria Elvira Poleti Martucci - Orientadora - Universidade Federal de Ouro Preto
Dra Karina Taciana Santos Rubio - Universidade Federal de Ouro Preto
Me Mariana Oliveira - Universidade Federal de Ouro Preto

Maria Elvira Poleti Martucci, orientadora do trabalho, aprovou a versão final e autorizou seu depósito na Biblioteca Digital de Trabalhos de
Conclusão de Curso da UFOP em 05/03/2026



Documento assinado eletronicamente por **Maria Elvira Poleti Martucci, PROFESSOR DE MAGISTERIO SUPERIOR**, em 05/03/2026,
às 11:56, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site http://sei.ufop.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **1069868** e o código CRC **623EC54D**.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço a Deus por toda a força e resiliência concedidas ao longo deste percurso; sem Ele, eu nada seria. Agradeço profundamente à minha mãe, pelo incentivo constante, apoio incondicional e por me ensinar o valor transformador do conhecimento. Sem ela, nada seria possível.

Ao meu namorado Diogo, à minha irmã Isabella, por serem sempre minha escuta e meu amparo e ao meu sobrinho Arthurzinho, por ser alegria em minha vida. À minha avó Maria José, agradeço por me acolher em um momento tão desafiador da graduação, e a todos os meus familiares, expresso ainda minha profunda gratidão, vocês foram fundamentais durante toda essa trajetória.

Aos amigos que a graduação me deu, sou imensamente grata por terem caminhado comigo, dividindo os momentos bons e ruins, superando desafios, conquistas e muitas risadas ao longo do caminho.

À minha orientadora, Prof.^a Dra. Maria Elvira, agradeço o incentivo, a paciência e a orientação cuidadosa até a conclusão deste trabalho. Agradeço também às *Daphnias magna* utilizadas neste estudo, pequenas, mas essenciais para o desenvolvimento desta pesquisa. Minha gratidão se estende à Escola de Farmácia de Ouro Preto, que abriu suas portas e me deu a oportunidade de me tornar farmacêutica. A todos os professores, técnicos e funcionários, o meu muito obrigada: vocês foram parte indispensável desta jornada.

RESUMO

Os contaminantes emergentes configuram um desafio crescente para a gestão ambiental e para a saúde pública, sobretudo devido à sua presença contínua em ambientes aquáticos, elevada persistência, potencial de bioacumulação e capacidade de provocar efeitos adversos mesmo em concentrações reduzidas. Diante desse cenário, este presente trabalho teve como propósito construir um banco de contaminantes emergentes já reportados em águas superficiais, além de estabelecer e validar o cultivo de *Daphnia magna* como organismo-teste para aplicação em ensaios ecotoxicológicos. O banco de dados foi desenvolvido a partir de levantamento bibliográfico e da *Contaminant Candidate List* da *Environmental Protection Agency* (CCL4 e CCL5), com organização dos compostos em categorias como PPCPs, pesticidas, PFAS, EDCs e contaminantes orgânicos. Para cada substância, foram reunidos parâmetros como modo de ionização, íon precursor e íons produto, com verificação realizada por meio do *software Xcalibur*. Paralelamente, o cultivo de *Daphnia magna* foi conduzido em condições laboratoriais controladas e validado por meio do ensaio de imobilização aguda com dicromato de potássio, conforme a diretriz OECD TG 202. Os resultados obtidos confirmaram a sensibilidade dos organismos e a adequação do cultivo para aplicação em estudos ecotoxicológicos de contaminantes emergentes. A integração entre o banco de dados analítico e os ensaios biológicos constitui uma ferramenta promissora para análises futuras com LC-HRMS e abordagens *suspect screening*, contribuindo de forma significativa para o monitoramento ambiental e para a avaliação dos riscos associados aos contaminantes emergentes.

Palavras-chave: Contaminantes emergentes; *Daphnia magna*; Ecotoxicologia; Dicromato de Potássio; LC-HRMS.

ABSTRACT

Emerging contaminants represent a growing challenge for environmental management and public health, mainly due to their continuous presence in aquatic environments, high persistence, bioaccumulation potential, and ability to cause adverse effects even at low concentrations. In this context, the present study aimed to build a database containing chemical-analytical information on environmental contaminants previously reported in surface waters, as well as to establish and validate the culture of *Daphnia magna* as a test organism for ecotoxicological assays. The database was developed through a bibliographic survey, and the candidate contaminant lists from the Environmental Protection Agency (CCL4 and CCL5), with compounds organized into categories such as PPCPs, pesticides, PFAS, endocrine disruptors, and other organic contaminants. For each substance, parameters including ionization mode, precursor ion, product ions, and retention time were compiled, with validation performed using the Xcalibur software. In parallel, the *D. magna* culture was maintained under controlled laboratory conditions and validated through an acute immobilization test using potassium dichromate, in accordance with OECD Guideline TG 202. The results confirmed the sensitivity of the organisms and the suitability of the culture for application in ecotoxicological studies of emerging contaminants. The integration of the analytical database and biological assays constitutes a promising tool for future analyses using LC-HRMS and suspect screening approaches, contributing to environmental monitoring and risk assessment of emerging contaminants.

Keywords: Emerging contaminants; *Daphnia magna*; Ecotoxicology; Potassium dichromate; LC-HRMS.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Exemplar de <i>Daphnia magna</i>	2
Figura 2 – Sistema experimental para eclosão dos cistos em aquário sob iluminação artificial	15
Figura 3 – Imagem ilustrativa do <i>software Xcalibur</i>	18
Figura 4 – Gráfico de Imobilização 24 horas	26
Figura 5 – Gráfico de Imobilização 48 horas	27

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Comparação do status regulatório de alguns contaminantes emergentes em diferentes países	9
Tabela 2 – Interpretação dos resultados do teste de nitrito (LabconTest)	16
Tabela 3 – Esquema Inicial de Alimentação Semanal	16
Tabela 4 – Número de substâncias inseridas no banco de dados por classe de contaminantes	21
Tabela 5 – Dados sobre cultivo de <i>Daphnia magna</i>	22
Tabela 6 – Esquema Final de Alimentação Semanal	24
Tabela 7 – Imobilização 24 horas	25
Tabela 8 – Imobilização acumulada após 48 horas de exposição	27

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

CCL: do inglês *Contaminant Candidate List*

CE50: Concentração Efetiva 50%

CE: Contaminantes Emergentes

DBO: Demanda Bioquímica de Oxigênio

DBP: do inglês *disinfection by-products*

decaBDE: do inglês *Decabromodiphenyl ether*

EDC's: do inglês *Endocrine Disrupting Chemicals*

EPA - US: do inglês *Environmental Protection Agency - United States*

HRMS: do inglês *High Resolution Mass Spectrometry*

LC-HRMS: do inglês *Liquid Chromatography-High Resolution Mass Spectrometry*

MEE: do inglês *Ministry of Ecology and Environment*

OECD: do inglês *Organisation for Economic Co-operation and Development*

PFAS: do inglês *Per- and Polyfluoroalkyl Substances*

POPS: do inglês *persistent organic pollutants*

PPCP's: do inglês *Pharmaceuticals and Personal Care Products*

UFOP: Universidade Federal de Ouro Preto

UE: do inglês *European Union*

VMP: Valor Máximo Permitido

WDF: do inglês *Water Framework Directive*

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	1
2 REVISÃO DA LITERATURA	3
2.1 Contaminantes emergentes – ocorrência e impactos toxicológicos	3
2.2 <i>Daphnia magna</i> - Ensaio de Ecotoxicidade	9
3 OBJETIVOS	12
3.1 Objetivo Geral	12
3.2 Objetivos Específicos	12
4 METODOLOGIA	13
4.1 Construção do banco de dados	13
4.2 Cultivo de <i>Daphnia magna</i>	14
4.2.1 Organismo-teste: <i>Daphnia magna</i>.....	14
4.3 Cultivo e eclosão	14
4.3.1 Manejo e alimentação	15
4.4 Preparo da solução de dicromato de potássio	17
4.4.1 Teste de imobilização aguda com dicromato de potássio	17
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	18
5.1 Construção do banco de dados	18
5.2 Cultivo de <i>Daphnia magna</i>	21
5.3 Teste de imobilização aguda com dicromato de potássio	24
5.3.1 Teste de imobilização – 24 e 48 horas	24
7 CONCLUSÃO	29
8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	30
APÊNDICE A – BANCO DE DADOS DE CONTAMINANTES EMERGENTES UTILIZADOS NO ESTUDO.....	41

1 INTRODUÇÃO

A intensificação das atividades humanas nas últimas décadas tem causado alterações significativas na qualidade dos recursos hídricos. O crescimento urbano, a expansão industrial e o uso intensivo de insumos farmacêuticos e agroquímicos resultaram na liberação contínua de substâncias químicas em ambientes aquáticos. Nesse contexto, destacam-se os chamados contaminantes emergentes, um grupo heterogêneo de compostos cuja ocorrência em diferentes matrizes ambientais têm despertado preocupação científica e regulatória (Soares; Leão, 2018; Montagner; Vidal; Acabaya, 2017).

Essas substâncias se diferenciam dos poluentes clássicos por não estarem plenamente contempladas em normas regulatórias consolidadas. Ainda assim, sua detecção recorrente, mesmo em concentrações traço, evidencia um problema persistente e de difícil solução. A diversidade de fontes de emissão e a complexidade química desses compostos, tornam o monitoramento ambiental e o controle por sistemas convencionais de tratamento, um desafio significativo para a gestão dos recursos hídricos (Montagner; Vidal; Acabaya, 2017).

A relevância desse tema está associada aos impactos já descritos em organismos aquáticos e em seres humanos, incluindo alterações endócrinas, distúrbios reprodutivos e outros efeitos adversos à saúde. Além disso, a persistência ambiental e o potencial de bioacumulação de determinados contaminantes aumentam os riscos ecológicos, podendo comprometer a dinâmica dos ecossistemas aquáticos e a qualidade da água destinada ao abastecimento (EPA, 2014; Montagner; Vidal; Acabaya, 2017).

Diante desse cenário, o uso de ferramentas complementares para avaliação dos efeitos tóxicos torna-se indispensável. Nesse sentido, a integração entre bioensaios ecotoxicológicos e técnicas analíticas avançadas, como a LC-HRMS associada a abordagem de suspect screening se tornam promissoras. Os bioensaio com organismos aquáticos, em especial com *Daphnia magna* (Figura 1), têm se consolidado como uma estratégia eficaz para a detecção de efeitos tóxicos por ser uma espécie que possui elevada sensibilidade a diferentes classes de contaminantes e por detectar efeitos subletais em ambientes de água doce, sendo, portanto, considerada um organismo sentinela (Albuquerque et al., 2023).

Figura 1 – Exemplar de *Daphnia magna*.



Fonte: Science Photo Library (2025)

Nesse contexto, o presente trabalho teve como objetivo a construção de um banco de dados de contaminantes emergentes e o estabelecimento do cultivo de *Daphnia magna* em condições laboratoriais controladas. A combinação entre o banco de dados e ensaios ecotoxicológicos é fundamental para o sucesso de análises químicas e toxicológicas, contribuindo para o avanço do monitoramento ambiental e para a compreensão dos riscos associados à presença desses compostos em ambientes aquáticos.

2 REVISÃO DA LITERATURA

2.1 Contaminantes emergentes – ocorrência e impactos toxicológicos

Nas últimas décadas, a preocupação com os contaminantes emergentes tem crescido significativamente, consolidando-se como um dos principais desafios contemporâneos para gestão ambiental e a proteção da saúde pública (EPA, 2014). Esse cenário é impulsionado pela persistência desses compostos no ambiente e por seus potenciais efeitos adversos sobre os ecossistemas e a saúde humana, mesmo quando presentes em concentrações extremamente baixas (EPA, 2014; Miyabara; Schmidt; Fonseca, 2021).

Esses contaminantes compreendem um conjunto variado de substâncias detectadas em água, solo, e biota, em sua maioria de origem antrópica, como fármacos e produtos de higiene pessoal (PPCPS), pesticidas e seus subprodutos, substâncias per e polifluoroalquiladas (PFAS), disruptores endócrinos (EDCS), subprodutos da desinfecção (DBPS), drogas ilícitas e produtos químicos industriais, embora também existam compostos naturais que, sob determinadas condições, podem representar riscos ao meio ambiente e à saúde humana (Soares; Leão, 2018; Montagner; Vidal; Acayaba, 2017).

A presença desses compostos nos ecossistemas está majoritariamente associada às atividades antrópicas. Segundo Santana (2013, p. 18), o padrão de consumo excessivo de medicamentos, produtos de limpeza e itens de higiene pessoal tem contribuído para que o esgoto doméstico se torne a principal via de entrada dessas substâncias nos ecossistemas aquáticos. Além disso, a liberação contínua de efluentes hospitalares e indústrias, somado ao esgoto urbano, tratado ou não tratado, e ao escoamento superficial de áreas agrícolas, constitui um conjunto significativo de rotas pelas quais essas substâncias chegam a rios, lagos e reservatórios (Aus Der Beek et al., 2016; Morin-Crini et al., 2022; Sunderland et al., 2019).

Um dos aspectos mais críticos da presença desses compostos no ambiente aquático é sua elevada persistência ambiental (Aus Der Beek et al., 2016). Embora frequentemente detectados em concentrações muito baixas, na ordem de nanogramas a picogramas por litro, parte desses compostos apresentam estruturas químicas altamente estáveis, resistentes à degradação natural, como os PFAS por exemplo, que possuem cadeia fluoroalquilada e ligação carbono-flúor, o que favorece sua persistência

e acúmulo progressivo em matrizes aquáticas (EPA, 2014; Gil et al., 2012; Saetchnikov, 2023).

Estudos conduzidos em diferentes regiões do mundo confirmam a presença recorrente desses contaminantes em matrizes aquáticas, evidenciando que sua ocorrência não se trata de eventos pontuais, mas de um problema ambiental consolidado em escala global (Aus Der Beek et al., 2016; Montagner et al., 2019; Morin-Crini et al., 2022). A revisão abrangente realizada por Aus der Beek et al. (2016) compilou dados de mais de mil estudos publicados, reportando a detecção de centenas de fármacos e metabólitos em águas superficiais, subterrâneas e destinadas ao consumo humano em mais de 70 países, abrangendo todos os continentes. Os autores demonstraram que diversas substâncias como carbamazepina, diclofenaco e antibióticos amplamente utilizados são detectados de forma consistente em diferentes contextos geográficos, indicando fontes contínuas de emissão e elevada persistência ambiental.

De forma semelhante, Montagner et al. (2019) corroboram esse cenário ao demonstrarem a ocorrência frequente de contaminantes em diferentes matrizes aquáticas brasileiras, como esgotos, águas superficiais e subterrâneas. Os autores destacaram que, mesmo em concentrações da ordem de $\text{ng}\cdot\text{L}^{-1}$ a $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, esses compostos são detectados de maneira sistemática, refletindo tanto o consumo contínuo quanto a baixa eficiência dos sistemas convencionais de tratamento de esgoto na sua remoção completa. A exposição contínua, ainda que em baixas concentrações, aumenta o risco de bioacumulação nos organismos aquáticos e de transferência ao longo da cadeia trófica, ampliando o potencial de impactos ecológicos e toxicológicos (Montagner et al., 2019; Boahen; Owusu; Adjei-Anim, 2025). Esse cenário é especialmente preocupante em ambientes aquáticos, nos quais a exposição crônica de organismos não-alvo pode resultar em alterações fisiológicas, reprodutivas e comportamentais, mesmo na ausência de mortalidade significativa (Montagner et al., 2019; Aus Der Beek et al., 2016; Morin-Crini et al., 2022).

Um dos organismos mais utilizados na avaliação dos impactos da presença dos contaminantes nos ecossistemas aquáticos é o microcrustáceo *Daphnia magna*, devido à sua elevada sensibilidade a uma diversidade de compostos químicos. Além disso, por atingir altas densidades populacionais, essa espécie constitui um importante recurso alimentar para os peixes e outros predadores aquáticos, atuando na transferência de

energia, matéria e contaminantes ao longo da cadeia trófica (Jarvis; Bernot; Bernot, 2014; Moro; Freitas, 2020; OECD, 2004). Assim, ao expor *Daphnia magna* a diferentes contaminantes emergentes, torna-se possível avaliar como esses compostos afetam os organismos aquáticos e, por extensão, o equilíbrio dos ecossistemas onde estão inseridos.

Estudos experimentais de Wagner et al. (2017) e Yuan et al. (2021) demonstram que a exposição crônica de *Daphnia magna* a diferentes grupos de contaminantes emergentes, como disruptores endócrinos, fármacos e pesticidas, pode resultar em redução significativa da taxa reprodutiva, atraso no desenvolvimento, alterações metabólicas e modificações comportamentais, incluindo alterações no padrão natatório e nas respostas à luz, mesmo na ausência de efeitos letais imediatos (Wagner; Simpson; Simpson, 2017; Yuan et al., 2021). Logo, é possível extrapolar esses efeitos na biota, indicando riscos ao equilíbrio ecológico e a manutenção das funções ecossistêmicas.

Resultados semelhantes foram observados por Leite (2024), que avaliou os efeitos de misturas de contaminantes sob diferentes condições térmicas, para simular a combinação entre a presença dos contaminantes juntamente com as mudanças climáticas emergentes. O estudo demonstrou que a combinação de poluentes com o estresse por aumento de temperatura intensificou os efeitos subletais em *Daphnia magna*, afetando negativamente sua mobilidade, comportamento e sobrevivência, o que reforça a vulnerabilidade dos ecossistemas aquáticos frente a múltiplos estressores ambientais.

Em relação à saúde humana, a exposição prolongada a contaminantes emergentes, mesmo em concentrações baixas, tem sido associada a diferentes alterações adversas, especialmente em contextos de exposição crônica. Entre as alterações relatadas destacam-se disfunções na tireoide, efeitos neurotóxicos, redução da fertilidade, imunotoxicidade e aumento do risco de desenvolvimento de neoplasias, variando conforme a classe química envolvida (Diamanti-Kandarakis, et al., 2009; Grandejean; Landrigan, 2014; Macedo et al., 2023). Esses efeitos são particularmente relevantes no caso de compostos com atividade desreguladora endócrina, os quais podem interferir na síntese, secreção, transporte e ação hormonal, comprometendo processos fisiológicos essenciais ao desenvolvimento, metabolismo e reprodução (Diamanti-Kandarakis et al., 2009). Além das alterações endócrinas, estudos em

humanos e em modelos experimentais têm associado a exposição a contaminantes emergentes a efeitos neurotóxicos, como prejuízos ao desenvolvimento neurológico, alterações cognitivas e distúrbios comportamentais, sobretudo quando a exposição ocorre em fases críticas do desenvolvimento humano (Grandejean; Landrigan, 2014). Esses efeitos podem se manifestar de forma subclínica e cumulativa, tornando sua identificação mais complexa em estudos populacionais (Grandejean; Landrigan, 2014). Evidências recentes também apontam que a exposição crônica a esses compostos pode estar associada ao aumento do risco de neoplasias hormônio-dependentes (Macedo et al., 2023). Diante dos dados expostos, é possível compreender a problemática da presença dos contaminantes emergentes no ecossistema e os impactos causados à saúde humana, sendo fundamental aprimorar as estratégias de detecção e monitoramento desses contaminantes.

Nesse contexto, a compreensão da ocorrência e da distribuição desses contaminantes tem sido viabilizada, sobretudo, pelo avanço das técnicas analíticas, especialmente para a cromatografia líquida acoplada à espectrometria de massas, tanto em análises *target* e *non-target*, que permitem a triagem de uma gama de substâncias, incluindo aquelas ainda não regulamentadas. Essas metodologias ampliam significativamente o número de compostos detectáveis em matrizes emergentes e favorecem a construção de bancos de dados químicos aplicados ao monitoramento ambiental e à avaliação de risco (Richardson; Ternes, 2017; Morin-Crini et al., 2022; Hollender et al., 2023).

2.2 Regulamentação

Apesar do crescente volume de evidências científicas acerca da ocorrência e dos efeitos dos contaminantes emergentes no meio ambiente e aos seres vivos, a regulamentação dessas substâncias permanece limitada e heterogênea em âmbito nacional e internacional.

No Brasil, os principais instrumentos normativos relacionados à qualidade da água são a Portaria GM/MS nº 888/2021 de 04 de maio de 2021, que estabelece os padrões de potabilidade da água para consumo humano e a Resolução CONAMA nº 357/2005 e nº 430/2011 que dispõem sobre a classificação dos corpos d'água e das condições para o lançamento de efluentes (Brasil, 2021; Conama, 2005; Conama, 2011). Essas normas contemplam diversos contaminantes tradicionais, como metais

pesados, compostos orgânicos e inorgânicos, subprodutos da desinfecção, alguns pesticidas e cianotoxinas, no entanto, a inclusão de contaminantes emergentes como bisfenol A, etinilestradiol, diclofenaco, carbamazepina e ácido perfluorooctanóico, entre outros, ainda é limitada (Brasil, 2021; Montagner; Vidal; Acayaba, 2017).

Em contraste, alguns países e blocos econômicos têm adotado mecanismos mais estruturados de vigilância ambiental. Na União Europeia (UE), a regulamentação da qualidade da água é orientada pela *Water Framework Directive* (WDF), que estabelece diretrizes para a proteção das águas superficiais e subterrâneas. Como parte desse sistema, foi criada a *Watch List*, uma lista temporária de monitoramento destinada a contaminantes emergentes selecionados com base em indícios de risco ambiental ou à saúde humana. Quando esses riscos são confirmados por evidências científicas consistentes, os compostos podem ser incluídos na lista de *Priority Substances*, passando a receber tratamento regulatório permanente (Comissão Europeia, 2020; Comissão Europeia, 2024; Oliveira; Agostineto; Siegloch, 2023). Entre os compostos comumente incluídos na *Watch List* destacam-se fármacos como diclofenaco, hormônios estrogênicos (17 β -estradiol e 17 α -etinilestradiol), antibióticos macrolídeos e contaminantes industriais persistentes (Comissão Europeia, 2025; Oliveira; Agostineto; Siegloch, 2023).

A atualização mais recente da *Watch List* foi publicada em setembro de 2025, e incorporou novos contaminantes, incluindo pesticidas, fármacos, bisfenóis e PFAS (Comissão Europeia, 2023; Conselho da União Europeia, 2025). Além dessas listas, a União Europeia também estabelece limites específicos para cada substância, assim como, para a concentração total dos contaminantes presentes em matrizes aquáticas (Oliveira; Agostineto; Siegloch, 2023).

Nos Estados Unidos, a regulamentação é conduzida pela *Environmental Protection Agency* (EPA) que adota a *Contaminant Candidate List* (CCL), uma lista que reúne substâncias candidatas à regulamentação em água potável. A elaboração da CCL segue um processo estruturado em etapas, que envolve a identificação de uma ampla gama de contaminantes, a triagem dessas substâncias e a classificação com base em dados de ocorrência e risco à saúde humana (Environmental Protection Agency, 2025).

Atualmente, a CCL5 é a versão mais recente, publicada em novembro de 2022, incluindo 66 substâncias químicas, três grupos químicos (PFAS, cianotoxinas e DBPs)

e 12 microrganismos, que foram selecionados de um universo de produtos químicos usados no comércio, pesticidas, toxinas biológicas, subprodutos de desinfecção e patógenos transmitidos (Environmental Protection Agency, 2022). Embora presentes na CCL, essas substâncias ainda não possuem regulamentação obrigatória em nível nacional, podendo, contudo, ser incluídas em normas futuras conforme o avanço das evidências científicas (Environmental Protection Agency, 2022).

A China, por sua vez, vem ampliando sua estrutura regulatória para incorporar os contaminantes emergentes à política ambiental do país. Esse movimento ganhou impulso com a publicação do *Action Plan for Controlling New Pollutants*, em 2022, que estabeleceu diretrizes voltadas à identificação, avaliação de risco e controle dos chamados *new pollutants*. O plano abrange grupos como poluentes orgânicos persistentes (POPs), disruptores endócrinos, antibióticos e microplásticos (China, 2022b).

Em continuidade a esse plano, o *Ministry of Ecology and Environment* (MEE), em cooperação com outros ministérios responsáveis por setores estratégicos, como indústria, agricultura e comércio, publicou, em 2023, a *List of Key Controlled New Pollutants 2023* (China, 2023). Trata-se de um instrumento oficial que reúne 14 contaminantes emergentes submetidos a medidas específicas de gestão de risco, entre eles PFAS, éter decabromodifenílico (decaBDE), parafinas cloradas de cadeia curta (SCCPs), hexaclorobutadieno e pentaclorofenol. Essas substâncias passaram a ser alvo de ações regulatórias como proibições de produção, restrições de uso, controles de importação e exportação e exigências de medidas adicionais de prevenção e mitigação ambiental, consolidando um marco regulatório dedicado à gestão de contaminantes emergentes no país (China, 2022a).

De forma integrada, a estratégia chinesa tem enfatizado o controle em instalações emissoras, o registro e avaliação de novas substâncias químicas, além da identificação de poluentes prioritários, aproximando-se, em termos funcionais, dos modelos europeus e norte-americanos.

De modo geral, a comparação entre o modelo regulatório brasileiro e os adotados por países e blocos econômicos mais desenvolvidos evidencia as lacunas normativas, especialmente no que se refere ao monitoramento sistemático de contaminantes emergentes (Montagner et al., 2019). No Brasil, observa-se que as regulamentações tendem a priorizar o monitoramento de contaminantes tradicionais.

Contudo, a crescente detecção de contaminantes emergentes em ambientes aquáticos enfatiza a importância da atualização contínua das normas nacionais. A Tabela 1 ilustra essas diferenças regulatórias para alguns contaminantes representativos.

Tabela 1 – Comparação do status regulatório de alguns contaminantes emergentes em diferentes países

Substância	Classe	Brasil	UE	EUA	China
Bisfenol A	EDC	Não regulamentado	Regulamentado/monitorado	Monitorado	Monitorado
17α-etinilestradiol	EDC	Não regulamentado	Monitorado	Monitorado	Monitorado
PFOA	PFAS	Não regulamentado	Regulado	Monitorado	Regulado
Diclofenaco	PPCP	Não regulamentado	Monitorado	Monitorado	Monitorado

Fonte: Adaptado de Brasil (2021); Comissão Europeia (2024); EPA (2022); China (2023).

2.2 *Daphnia magna* - Ensaio de Ecotoxicidade

Os bioensaios com organismos aquáticos têm se consolidado como estratégia fundamental para interpretar os efeitos desses poluentes sobre os ecossistemas. Entre os modelos experimentais mais empregados, o uso de *Daphnia magna* destaca-se pela elevada sensibilidade a diferentes grupos de contaminantes, ampla distribuição geográfica e capacidade reprodutiva, que favorecem a condução de estudos controlados (Deng et al., 2017; Albuquerque et al., 2023).

Como consequência dessas propriedades, a *Daphnia magna* é considerada uma espécie sentinela, destacando-se pela elevada sensibilidade a micropoluentes e pela capacidade de atuar como bioindicador da qualidade da água, permitindo a detecção de efeitos, que comprometem funções vitais, mesmo em concentrações não letais (Freitas; Magalhães, 2008; Moro; Freitas, 2020; Ribeiro et al., 2021).

Nesse contexto, a relevância científica da espécie decorre não apenas de sua função ecológica em ambientes de água doce, mas também de seu curto ciclo de vida, resposta rápida a perturbações e reprodução por partenogênese (ABNT NBR 12713, 2016; Deng et al., 2017; Lee et al., 2023; Ebert, 2022). Essa característica reprodutiva possibilita a obtenção de linhagens geneticamente homogêneas, reduzindo a variabilidade e aumentando a reprodutibilidade dos resultados, aspecto fundamental para protocolos que exigem padronização experimental (ABNT, 2016; OECD, 2004; Ribeiro et al, 2021).

A elevada sensibilidade da *Daphnia magna* abrange uma ampla gama de contaminantes, entre eles, hormônios, antibióticos e toxinas de cianobactérias, que podem induzir desde efeitos endócrinos até estresse oxidativo e malformação de descendentes, prejudicando a reprodução e a estabilidade populacional (Ahmed, 2023; Haluch et al., 2023; Belhamzaoui et al., 2023). Essa diversidade de respostas mostra que a espécie não apenas indica a toxicidade de compostos isolados, mas também revela os efeitos combinados de misturas complexas presentes nos ambientes naturais (Ebert, 2022; Silva, 2022).

Entretanto, os ensaios ecotoxicológicos com *Daphnia* também apresentam desvantagens. Os resultados obtidos em condições laboratoriais não reproduzem toda a complexidade dos ecossistemas naturais, e a representatividade ecológica é limitada, já que os efeitos observados em *Daphnia* não podem ser generalizados para todas as espécies aquáticas; a sensibilidade da espécie pode variar conforme o tipo de poluente, sendo necessário complementar os testes com outros organismos-teste; diferentes cepas podem apresentar respostas distintas; e os ensaios crônicos, como o OECD 211 (OECD, 2004), demandam tempo e infraestrutura especializada, o que pode limitar sua aplicação em alguns laboratórios (Čelíč et al, 2021; Schymanski et al., 2014).

Apesar das limitações, a combinação de relevância ecológica e experimental levou à incorporação da espécie em protocolos normativos internacionais. Entre eles, destacam-se a Diretriz OECD nº 202, referente ao ensaio de imobilização aguda com *Daphnia sp.*, e a Diretriz OECD nº 211, destinada exclusivamente à avaliação da reprodução em *Daphnia magna* (OECD, 2004; OECD, 2012). Essa normatização assegura a comparabilidade dos procedimentos e resultados entre diferentes laboratórios.

Além das condições de cultivo e parâmetros experimentais padronizados, a utilização de substâncias de referência é igualmente fundamental para avaliar a sensibilidade dos organismos. Entre essas substâncias, destaca-se o dicromato de potássio ($K_2Cr_2O_7$), empregado como controle positivo em testes de toxicidade aguda com *Daphnia magna* (OECD, 2004).

O dicromato de potássio é utilizado há décadas em protocolos internacionais, como OECD TG 202, e diretrizes da EPA, justamente por possuir um perfil toxicológico bem estabelecido, respostas reprodutíveis e elevada sensibilidade da espécie a esse composto. Estudos clássicos, como os de Khangarot e Ray (1989), estabeleceram

faixas de CE_{50} , que são usadas até os dias atuais como referência, enquanto trabalhos mais recentes confirmam a estabilidade desse perfil toxicológico (OECD, 2004; Gopi et al., 2012). Sendo assim, o uso do dicromato de potássio permite a avaliação da toxicidade aguda e a verificação da sensibilidade do cultivo.

Nos ensaios de imobilização aguda, neonatos com menos de 24 horas de vida são expostos por 48 horas a diferentes concentrações de substâncias químicas, e a imobilização é utilizada como principal indicador. Esse efeito está associado a distúrbios nos sistemas neuromusculares que comprometem a condução de impulsos e a capacidade natatória (OECD, 2004).

Nos ensaios crônicos, especialmente no ensaio de reprodução padronizado pela Diretriz nº 211, cuja duração pode ultrapassar 21 dias, observa-se a capacidade da espécie de revelar efeitos subletais e de longo prazo, como alterações reprodutivas e de crescimento (OECD, 2004; OECD, 2012). Em ensaios com efluentes provenientes de lagoas facultativas, Pessoa et al. (2019) observaram mortalidade de até 20% em *Daphnia magna* na concentração de 20% do efluente em teste crônico, indicando risco potencial a longo prazo aos organismos expostos. Essa sensibilidade amplia o alcance dos bioensaios, permitindo avaliar a toxicidade aguda e os efeitos cumulativos e crônicos que podem comprometer a dinâmica populacional.

Diante dos desafios impostos pela presença dos contaminantes em diversos compartimentos ambientais, torna-se evidente a aplicabilidade de ensaios com *Daphnia magna* como ferramenta para avaliar a qualidade da água. A elevada sensibilidade da espécie, associada à utilização de protocolos padronizados para testes agudos e crônicos, reforça seu papel como organismo-teste.

3 OBJETIVOS

3.1 Objetivo Geral

Validar o ensaio de imobilização em *Daphnia magna* para avaliação da toxicidade de contaminantes emergentes.

3.2 Objetivos Específicos

Os objetivos específicos deste trabalho foram:

3.2.1 Realizar o levantamento bibliográfico de possíveis contaminantes emergentes para subsidiar a construção de um banco de dados;

3.2.2 Estabelecer o cultivo de *Daphnia magna* em condições controladas e eficientes no laboratório de toxicologia da Escola de Farmácia de Ouro Preto, para futuras análises de contaminantes emergentes;

3.2.3 Validar o teste de imobilização aguda com *Daphnia magna* de acordo com o protocolo OECD TG 202 (OECD, 2004);

4 METODOLOGIA

4.1 Construção do banco de dados

A construção do banco de dados foi realizada com a finalidade de subsidiar análises de contaminantes emergentes utilizando técnicas de LC-HRMS empregando a abordagem de *suspect screening*.

A etapa inicial consistiu em um levantamento criterioso das substâncias já identificadas em águas superficiais, com base na literatura e nas listas de candidatos a contaminantes da EPA, especificamente nas versões *CCL4* e *CCL5* (EPA, 2022; EPA, 2025). Os compostos selecionados foram classificados em cinco categorias: PPCPs (Fármacos e Produtos de Cuidado Pessoal), Pesticidas e Seus Produtos, PFAS (Substâncias Per- e Polifluoroalquil), EDCs (Disruptores Endócrinos) e Contaminantes Orgânicos.

Para cada composto, foram compilados os parâmetros analíticos essenciais para aplicação em análises de LC-HRMS, incluindo modo de ionização, valor do íon precursor, íons produto e tempo de retenção. Esses dados foram extraídos do *PubChem*, repositório público de moléculas mantido pelo *National Center for Biotechnology Information* (NCBI, 2024), vinculado à *U.S. National Library of Medicine*. A extração das informações foi realizada individualmente, por meio da busca nominal de cada composto no *PubChem*, seguida da consulta à seção de informações espectrais, na qual estão disponíveis os espectros de massas e demais dados relevantes para a caracterização espectrométrica.

Ressalta-se que nem todas as substâncias apresentavam, na base consultada, informações completas para todos os parâmetros analíticos. Nesses casos, os campos correspondentes foram indicados por meio de travessão (—), representando ausência de dados disponíveis na plataforma. Além disso, os valores extraídos foram mantidos conforme apresentados na base original, podendo ocorrer pequenas variações de formatação entre os registros, uma vez que as informações foram obtidas diretamente do repositório público sem alteração dos dados reportados.

Após a etapa inicial de compilação das informações, os valores de m/z (relação massa/carga) dos íons precursores foram minuciosamente conferidos utilizando o *software Xcalibur*, gerando espectros contendo a massa exata teórica e os picos isotópicos previstos para cada substância.

Dessa forma, a metodologia adotada permitiu reunir e organizar os dados dos contaminantes emergentes de forma estruturada, constituindo um banco de dados confiável para subsidiar as análises ecotoxicológicas e a interpretação integrada dos resultados.

4.2 Cultivo de *Daphnia magna*

4.2.1 Organismo-teste: *Daphnia magna*

A espécie *Daphnia magna* foi utilizada como organismo-teste nos ensaios de toxicidade aguda, conforme a diretriz OECD TG n° 202 (OECD, 2004). Para a obtenção dos organismos, foram comprados cistos de um criador especializado e, após a eclosão, os neonatos foram utilizados nos ensaios experimentais.

4.3 Cultivo e eclosão

Inicialmente, para o cultivo, foi utilizado um aquário com um volume de 6 litros, equipado com uma mangueira de silicone posicionada no centro e ao fundo do aquário, conectada a uma bomba de ar, para recirculação e oxigenação adequada da água. Além disso, um termostato foi fixado na parede lateral interna, por meio de ventosas, para a regulação da temperatura dentro da faixa de $30 \pm 2^\circ\text{C}$ durante todo o cultivo.

Para a preparação do meio, foram adicionados aproximadamente 4 litros de água da torneira ao aquário, previamente condicionada com duas gotas de *Aquasafe*® (condicionador de água) por litro, com a finalidade de remover o cloro presente na água.

A etapa de eclosão foi iniciada em uma garrafa PET de 500 mL contendo água livre de cloro e mantida na mesma faixa de temperatura. A garrafa foi fixada no fundo do aquário por meio de ventosas, sob iluminação artificial contínua (24h/dia), conforme ilustrado na Figura 2.

Figura 2 – Sistema experimental para eclosão dos cistos em aquário sob iluminação artificial



Fonte: Autoria própria (2023).

Após 24h, observou-se a eclosão dos cistos e os neonatos foram cuidadosamente transferidos para o aquário, na proporção de 80 indivíduos para cada 4 L de água. Após 72h da eclosão dos cistos, o aquário foi realocado para uma sala com ciclo de iluminação claro-escuro 16h: 8h, e uma luminária direcionada ao centro do aquário foi utilizada, sendo ligada pela manhã (às 8h) e desligada ao final da tarde (às 17h), de modo a simular condições mais próximas das condições naturais.

Todos os procedimentos relacionados à alimentação, controle de pH, troca de água e verificação de nitrito foram devidamente padronizados, conforme descrito no item 4.3.1.

4.3.1 Manejo e alimentação

As *Daphnias* requerem um ambiente controlado para o sucesso do cultivo. Foram adotadas medidas de controle de temperatura (por meio de termostato), luminosidade (com uso de temporizador), alimentação, testes de nitrito e limpeza dos aquários, a fim de garantir condições adequadas aos organismos.

Para padronizar os cuidados diários, foram elaborados protocolos específicos que contemplam o manejo, alimentação, limpeza e monitoramento térmico da água. O pH foi acompanhado diariamente com fitas indicadoras e mantido dentro da faixa recomendada (6,0 - 9,0), conforme estabelecido pela OECD TG 202 (OECD, 2004).

A limpeza dos aquários foi realizada quinzenalmente, com a substituição de 50% do volume de água, de modo a garantir condições ideais ao cultivo. Paralelamente à

troca de água, foi realizado o ensaio colorimétrico de nitrito, utilizando o kit Labcon Test, conforme instruções do fabricante. Esse procedimento permitiu monitorar a qualidade do meio, sendo o valor ideal de nitrito de 0,0 ppm, como apresentado na Tabela 2.

Tabela 2 – Interpretação dos resultados do teste de nitrito (LabconTest)

Classificação	Concentração de nitrito (ppm)
Ideal	0,0
Aceitável	0,25
Crítico	0,5
Perigoso	1,0 a 2,8

Fonte: Labcon (2020).

A temperatura foi registrada duas vezes ao dia, nos períodos da manhã e da tarde, garantindo sua permanência entre 30 ± 2 °C, condição para a sobrevivência, crescimento e reprodução das *Daphnias*. A oferta de alimento teve início somente após a confirmação da eclosão dos cistos, evidenciada pela presença das *Daphnias* juvenis. A alimentação foi realizada duas vezes por semana, em dias alternados, sempre no período da manhã (Tabela 3). Na primeira semana, a dieta foi fornecida às segundas e quintas-feiras; na semana seguinte, às terças e sextas-feiras, mantendo esse padrão de alternância ao longo das semanas subsequentes. A dieta consistiu em dois tipos de alimentos: ração (0,0100 g) e fermento seco (0,0050 g), conforme apresentado na Tabela 3.

Tabela 3 – Esquema Inicial de Alimentação Semanal

Semana	Dia da Semana	Alimentação	Quantidade (g)
Semana 1	Segunda-feira	Ração	0,0100
	Quinta-feira	Fermento seco	0,0050
Semana 2	Terça-feira	Ração	0,0100
	Sexta-feira	Fermento seco	0,0050

Fonte: Autoria própria (2025).

4.4 Preparo da solução de dicromato de potássio

As soluções de dicromato de potássio foram preparadas utilizando água aclimatada (21 °C) e dicromato de potássio nas seguintes concentrações: 100 ng/mL, 50 ng/mL, 25 ng/mL, 10 ng/mL, 5 ng/mL e 0,1 ng/mL. As soluções foram preparadas imediatamente antes do início do experimento, de modo a assegurar sua estabilidade durante o teste.

4.4.1 Teste de imobilização aguda com dicromato de potássio

Para a execução do teste de imobilização aguda, procedeu-se à separação de 21 tubos Falcon, com uma capacidade de 15 mL. Para cada uma das seis concentrações testadas, foram utilizados três tubos de ensaio, totalizando 18 réplicas. Adicionalmente, três tubos foram destinados ao controle negativo, somando 21 tubos ao todo. A cada tubo, foi adicionado 10 mL da respectiva solução, na qual foram inseridas cinco *Daphnias* com menos de 24 horas de vida. Desse modo, foram utilizadas 105 *Daphnias* juvenis no ensaio.

Para a retirada dos organismos do aquário de cultivo, as *Daphnias* foram submetidas a uma redução gradual da temperatura, até que se atingisse aproximadamente 21 °C, valor compatível com a temperatura recomendada pela OECD TG 202 (OECD, 2004). A temperatura das soluções nos tubos foi aferida previamente à introdução dos organismos, registrando uma média de 21,2 °C, dentro da faixa normativa, permitindo a transferência segura para seus respectivos tubos.

Os tubos foram mantidos em banho-maria termostático a 21°C, com ciclo de iluminação controlado (16:8 h claro: escuro). Após 24 h e 48 h, os tubos foram agitados a fim de verificar a mobilidade, sendo consideradas imobilizadas as *Daphnias* que permaneceram sem nadar durante 15 segundos, mesmo que ainda apresentem movimento dos apêndices. Durante o ensaio foram registrados os indivíduos imobilizados, bem como possíveis alterações comportamentais ou anomalias morfológicas observadas. O ensaio foi considerado válido quando a taxa de imobilização observada no controle negativo permaneceu inferior a 10%, conforme estabelecido pela diretriz OECD TG 202.

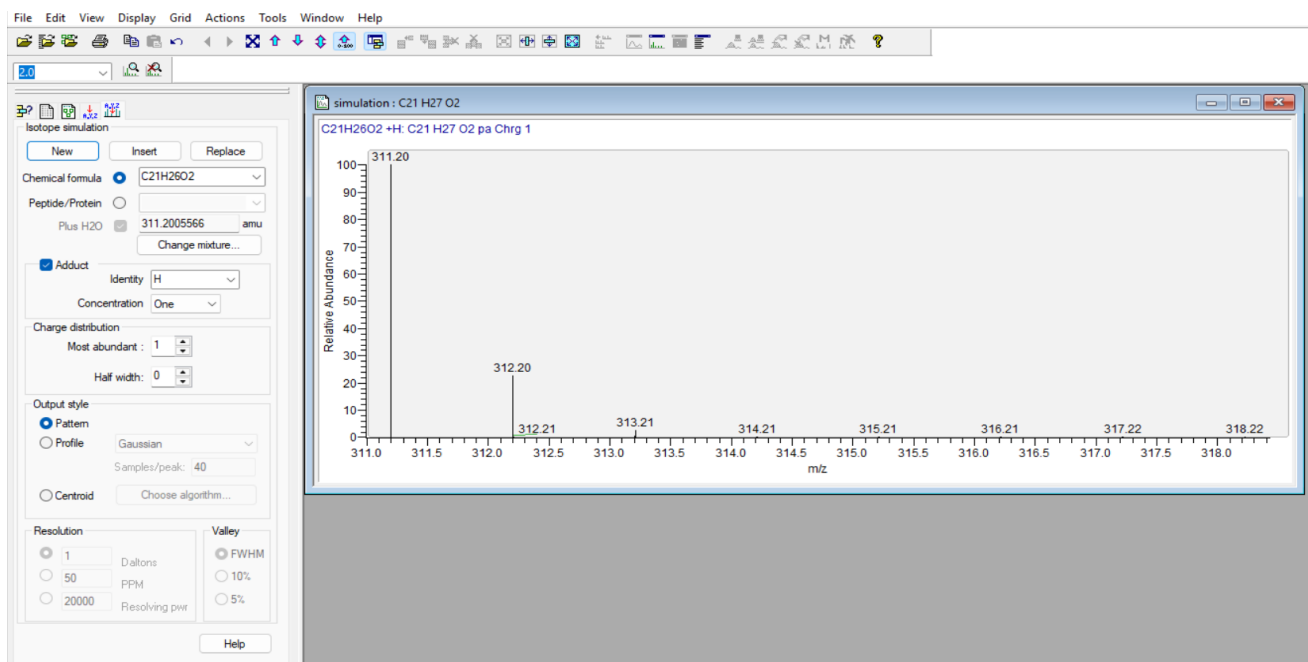
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Construção do banco de dados

O banco de dados desenvolvido neste trabalho foi elaborado a partir de um levantamento bibliográfico e da coleta de informações em listas de contaminantes candidatos publicadas pela EPA, como as versões *CCL 4* e *CCL 5*. Com base nessas fontes, foi possível identificar e agrupar os contaminantes em cinco categorias principais: PPCPs, PFAS, EDCs, pesticidas e seus derivados e compostos orgânicos.

Após a seleção e organização das substâncias, foi realizada a verificação do parâmetro analítico íon precursor inserido no banco de dados, com o objetivo de garantir o rigor das informações incluídas. Para a conferência desse parâmetro, a fórmula molecular e o modo de ionização de cada substância foram inseridos no *software Xcalibur* para o cálculo da massa exata teórica do íon precursor. Os valores obtidos foram então comparados com as massas dos íons precursores extraídas do *PubChem*, garantindo assim, a confiabilidade das informações incluídas no banco, conforme ilustrado na Figura 3.

Figura 3 – Imagem ilustrativa do *software Xcalibur*



Fonte: Autoria própria (2025).

A seleção do íon precursor, baseada no modo de ionização dos compostos, é essencial para garantir precisão nas análises por LC-HRMS, portanto a determinação da massa exata dos compostos constitui uma etapa fundamental para a confiabilidade do banco de dados (Modumtech, 2023). Além disso, a inclusão de informações como a fórmula molecular e os íons produto, são essenciais para confirmar a identidade química das substâncias, uma vez que os íons produto funcionam como marcadores específicos para confirmação estrutural (Modumtech, 2023).

O banco de dados desenvolvido neste estudo representa uma ferramenta de suporte para análises de contaminantes emergentes utilizando a abordagem de *suspect screening*. Ao reunir informações estruturadas sobre diferentes classes de compostos, ele amplia o potencial de triagem qualitativa em amostras ambientais, mesmo na ausência de padrões analíticos de referência (Čelić et al, 2021).

Nesse contexto, estudo recentes, como o de Hollender et al. (2023), indicam que a combinação de LC-HRMS com bibliotecas extensivas tem aumentado significativamente a capacidade de detecção de contaminantes emergentes. Um exemplo da aplicação prática do *suspect screening* foi realizado no Delta do Ebro, na Catalunha (Espanha), onde pesquisadores analisaram amostras de águas fluviais e costeiras utilizando LC-HRMS com uma lista de 360 compostos suspeitos fornecida pela Agência Catalã da Água (Čelić et al., 2021). Neste estudo, 37 contaminantes foram confirmados, incluindo fármacos como carbamazepina, venlafaxina e telmisartana, além de pesticidas e fungicidas como terbutylazine, terbutryn, azoxystrobin e tebuconazol. Os resultados mostraram que pesticidas eram mais frequentes em canais de irrigação, enquanto fármacos e produtos de cuidado pessoal predominavam em efluentes de estações de tratamento de esgoto e no ambiente marinho. Dez desses compostos foram classificados como de alto risco ecológico, sendo considerados marcadores de poluição antropogênica (Čelić et al., 2021).

Esse estudo é corroborado pelo estudo de Chiaia-Hernández et al. (2020), que utilizaram uma abordagem combinada de *target e suspect screening* para a análise de 500 compostos halogenados em solos e sedimentos. A triagem foi baseada em um banco de dados suíço contendo informações sobre produtos químicos industriais e domésticos já identificados. Como resultado, foram confirmadas a presença de 96 substâncias, com sobreposição de 34 nos solos e sedimentos, incluindo fármacos, pesticidas e produtos de transformação. Os autores observaram que solos agrícolas

e áreas influenciadas por descargas de estações de tratamento de esgoto podem atuar como reservatórios de contaminantes persistentes. Esses estudos demonstram como o *suspect screening* pode revelar contaminantes emergentes relevantes mesmo na ausência de padrões analíticos, além de subsidiar políticas públicas e estratégias de monitoramento emergentes.

Além da abordagem *suspect screening*, existe também a *non-target screening*, uma estratégia que busca identificar sinais desconhecidos em análises utilizando a espectrometria de massa de alta resolução (HRMS), que permite a descoberta de contaminantes ainda não catalogados em bibliotecas. Embora não tenha sido o foco deste trabalho, é importante reconhecer que ambas as abordagens são complementares e vêm sendo aplicadas em estudos emergentes internacionais, ampliando a capacidade de vigilância e identificação de poluentes (Hollender; Schymanski, 2017; Alampanos; Lambropoulou, 2024).

Essas metodologias, aplicadas em diferentes estudos sobre contaminantes emergentes, encontram respaldo nas diretrizes internacionais consolidadas para abordagens *suspect screening* e *non-target screening* por Hollender et al. (2023), desenvolvidas no contexto da *NORMAN Network*. Essa rede reúne laboratórios e centros de pesquisa de diversos países e atua como plataforma colaborativa, promovendo a harmonização e o desenvolvimento de práticas metodológicas voltadas à construção de bibliotecas de compostos comparáveis internacionalmente. A utilização dessas diretrizes padronizadas aumenta a confiabilidade e reprodutibilidade das análises, sendo especialmente relevante em países como o Brasil, onde há escassez de padrões analíticos de referência.

Apesar dos benefícios, é importante reconhecer as limitações da abordagem. A confiabilidade dos resultados depende diretamente da qualidade e abrangência das bibliotecas utilizadas, e a técnica não fornece quantificação precisa sem padrões analíticos, sendo muitas vezes restrita a estimativas semi-quantitativas (Čelić et al., 2021; Schymanski et al., 2014). Além disso, o processamento de grandes volumes de dados exige *softwares* robustos e *workflows* bem estruturados, o que demanda infraestrutura avançada e pessoal especializado (Hollender et al., 2019; Hollender et al., 2023). Essas limitações não reduzem sua relevância, mas reforçam que a *suspect screening* é uma ferramenta de triagem inicial de compostos de maior preocupação ambiental.

Como resultado deste estudo, o banco de dados consolidado reuniu informações sobre 615 substâncias distribuídas em cinco classes de contaminantes, conforme apresentado na Tabela 4. A lista completa das substâncias incluídas no banco de dados está apresentada no Apêndice A.

Tabela 4 – Número de substâncias inseridas no banco de dados por classe de contaminantes

Classe de contaminante	Número de substâncias
PPCP's	216
PFA's	109
EDC's	57
Pesticidas e seus subprodutos	109
Compostos orgânicos	108
Produtos químicos industriais	20

Fonte: Autoria própria (2025).

Cada registro, organizado em planilha Excel, contém informações essenciais para análises por LC-HRMS, incluindo fórmula molecular, modo de ionização, íon precursor e íons produto, servindo como suporte para abordagens de *suspect screening* e permitindo a triagem de contaminantes emergentes mesmo na ausência de padrões analíticos disponíveis.

5.2 Cultivo de *Daphnia magna*

A espécie *Daphnia magna* é amplamente utilizada em ensaios toxicológicos, sendo escolhida oficialmente para monitoramento de efluentes industriais, para o registro de pesticidas, para a avaliação de novas formulações químicas e determinação de concentrações máximas permitidas de agentes tóxicos no meio aquático (Ahmed, 2023). Seu cultivo em condições controladas é relativamente simples e reconhecido internacionalmente há décadas, sendo um importante instrumento na avaliação da toxicidade de substâncias presentes na água (OECD, 2004).

Os cultivos realizados no Laboratório de Toxicologia da Escola de Farmácia seguiram as orientações da diretriz OECD TG 202 (OECD, 2004), com monitoramento diário das condições. A única adaptação realizada foi na temperatura do cultivo, ajustada para a faixa de $30 \pm 2^\circ\text{C}$, com o objetivo de otimizar a eclosão dos cistos e a sobrevivência das *Daphnias*. A seguir, são apresentados os dados referentes ao desempenho dos cultivos ao longo do período experimental:

Tabela 5 – Dados sobre cultivo de *Daphnia magna*.

Cultivo de <i>D. magna</i>	Duração	Eventos Principais no Cultivo
1°	76 dias	Superdosagem de fermento no 32° dia e queda de energia no 60° dia
2°	22 dias	Possível desnutrição
3°	13 dias	Possível desnutrição
4°	45 dias	Introdução de <i>espirulina</i> com aumento de nitrito
5°	29 dias	Cultivo estável
6°	10 dias	Cultivo estável

Fonte: Autoria própria (2025).

Durante o primeiro cultivo, observou-se uma queda significativa na população de *Daphnias* a partir do 38° dia de cultivo, ocorrida poucos dias após a administração incorreta de 0,0500 g de fermento no 32° dia, quantidade 10 vezes superior à recomendada pelo protocolo (0,0050 g). Essa administração incorreta de matéria orgânica pode ter intensificado a atividade microbiana, elevando a Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO) e reduzindo a disponibilidade de oxigênio dissolvido, condição prejudicial a organismos aquáticos aeróbios (Brandelero; Siqueira; Lima, 2010).

Segundo Moro & Freitas (2020), a qualidade da água e o equilíbrio químico do meio são fatores determinantes para a sobrevivência de organismos aquáticos em cultivo, incluindo microcrustáceos como *Daphnia magna*. Ressalta-se que não foram observadas variações significativas nos valores de pH nem nas concentrações de nitrito ao longo do período, indicando que a redução populacional observada não esteve associada a alterações desses parâmetros, mas possivelmente ao desequilíbrio orgânico do meio decorrente do excesso de alimento.

Outro evento crítico ocorreu ainda no primeiro cultivo, no 60º dia, devido a uma interrupção do fornecimento de energia na UFOP, que causou queda abrupta da temperatura do aquário para valores abaixo da faixa utilizada. Apesar de a iluminação também ter sido afetada durante o evento, não há evidência de que a ausência temporária de luz provoque mortalidade direta. Estudos sobre fotoperíodo demonstram que mudanças na luz influenciam principalmente no comportamento, alimentação e reprodução, sem impactar diretamente a taxa de sobrevivência (Ponton et al., 2019). Por outro lado, variações térmicas abruptas são reconhecidas como fator de estresse fisiológico, podendo reduzir a sobrevivência e comprometer a reprodução das *Daphnias* (Nowakowski; Slugocki, 2021). Assim, a queda de temperatura se apresenta como o fator mais plausível para explicar a mortalidade observada durante o episódio (Gust et al., 2019).

No 2º e 3º cultivo, apesar do cumprimento dos parâmetros estabelecidos, os resultados foram insatisfatórios. Dada a ausência de falhas identificáveis, levantou-se a hipótese de deficiência nutricional como fator limitante, hipótese consistente com estudos que demonstram a sensibilidade de *Daphnia magna* a variações nutricionais (Ahmes, 2023; Gust et al., 2019).

Dessa forma, o 4º cultivo foi realizado com o intuito de sanar as deficiências nutricionais e, portanto, foi incluída espirulina na dieta (Olvera-Novoa et al., 1998; Güroy et al., 2022). Esse cultivo apresentou êxito na eclosão dos cistos, entretanto após a introdução da espirulina na dieta, observou-se aumento da mortalidade, associado à elevação dos níveis de nitrito, medidos na faixa de 1,0 a 2,8 ppm, classificados como perigosos conforme a Tabela 1. A espirulina pode reduzir compostos nitrogenados em sistemas aquáticos, mas também pode liberar amônia e nitrito quando ocorre morte celular ou acúmulo de matéria orgânica, especialmente em condições de baixa luminosidade (Silva et al., 2020; Chuntapa; Powtongsook; Menasvet, 2003). Esse efeito já foi descrito por Barroso (2009), que relaciona a presença de matéria orgânica ao aumento da concentração de nitrito e à mortalidade de organismos aquáticos.

Diante desse cenário, buscou-se investigar as causas das alterações por meio da troca parcial da água, restabelecendo os níveis ideais de nitrito. Contudo, após nova oferta de espirulina, observou-se o aumento da mortalidade, evidenciando a associação entre o acúmulo de matéria orgânica, a elevação dos níveis de nitrito e a redução da sobrevivência dos organismos. Para contornar esse problema, as trocas

parciais de água passaram a ser realizadas nos dias de administração da espirulina, o que possibilitou a manutenção dos níveis de nitrito dentro dos padrões adequados, e a permanência da espirulina na dieta.

Após a resolução dos problemas observados nos cultivos anteriores, foram consolidadas as condições finais para manutenção e sobrevivência das *Daphnias magna* no laboratório. O sistema foi mantido com temperatura controlada em 30 ± 2 °C, fotoperíodo claro-escuro 16h:8h e pH estável entre 6,0 e 9,0, sem a necessidade de ajuste com bicarbonato de sódio. A dieta foi padronizada com oferta alternada de ração (0,0100 g), fermento seco (0,0050 g) e espirulina (0,0050 g), duas vezes por semana, para garantir um aporte nutricional equilibrado, como mostrado na Tabela 6.

Tabela 6 – Esquema Final de Alimentação Semanal

Semana	Dia da Semana	Alimentação	Quantidade (g)
Semana 1	Segunda-feira	Ração	0,0100
	Quinta-feira	Fermento seco	0,0050
Semana 2	Terça-feira	Espirulina	0,0050
	Sexta-feira	Ração	0,0100

Fonte: Autoria própria (2025)

Além disso, as trocas parciais de água passaram a ser realizadas nos dias de administração da espirulina, com substituição de 50% do volume, a fim de evitar o acúmulo de compostos nitrogenados, especialmente nitrito. Nessas condições, os cultivos 5° e 6° apresentaram estabilidade populacional e organismos saudáveis, possibilitando a utilização das *Daphnias* nos ensaios de imobilização aguda.

5.3 Teste de imobilização aguda com dicromato de potássio

5.3.1 Teste de imobilização – 24 e 48 horas

A avaliação da toxicidade aguda utilizando *Daphnia magna* como organismo-teste, permitiu verificar a sensibilidade do cultivo mantido em laboratório por meio da exposição ao dicromato de potássio, substância de referência recomendada em

ensaios ecotoxicológicos. Nesse sentido, o ensaio teve como principal finalidade validar o cultivo, avaliando se a resposta observada estava compatível com o comportamento esperado e adequada ao uso em bioensaios.

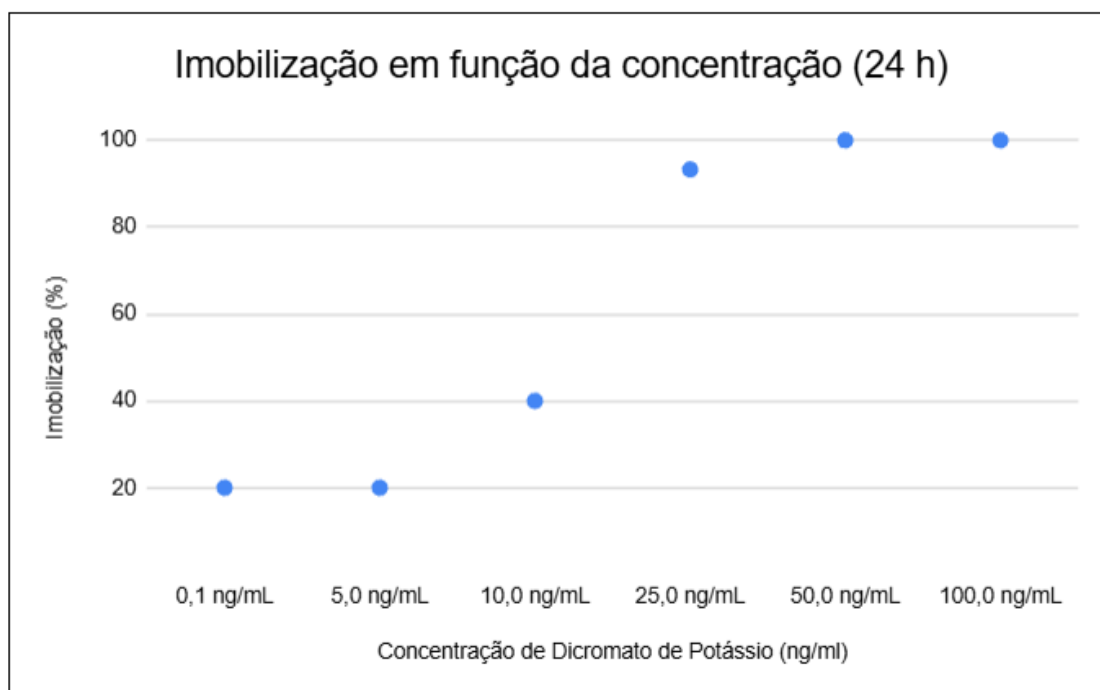
Os ensaios foram conduzidos conforme a diretriz OECD TG 202 (OECD, 2004), que define CE_{50} como a concentração capaz de imobilizar 50% dos organismos no intervalo de 24 e 48 horas. Segundo o protocolo, são considerados imobilizados os organismos incapazes de nadar dentro de 15 segundos após leve agitação do meio, mesmo que ainda apresentem movimento dos apêndices. Durante todo o ensaio, as condições físico-químicas da água foram mantidas dentro dos critérios normativos ao longo de todo o ensaio, com pH entre 6,5 e 9,0 e temperatura entre 20 e 22°C, assegurando validade experimental.

Os resultados obtidos para a imobilização de *D. magna* após 24 horas estão apresentados na Tabela 7 e no Figura 4.

Tabela 7 – Imobilização 24 horas

Concentração	Imobilização da daphnias após 24 horas			
	Tubo 1	Tubo 2	Tubo 3	% de imobilização
0,1 ng/mL	1	1	1	20
5 ng/mL	1	1	1	20
10 ng/mL	2	2	2	40
25 ng/mL	4	5	5	93,3
50 ng/mL	5	5	5	100
100 ng/mL	5	5	5	100
Controle Negativo	0	0	0	0

Fonte: Autoria própria (2025).

Figura 4 – Gráfico de Imobilização 24 horas

Fonte: Autoria própria (2025).

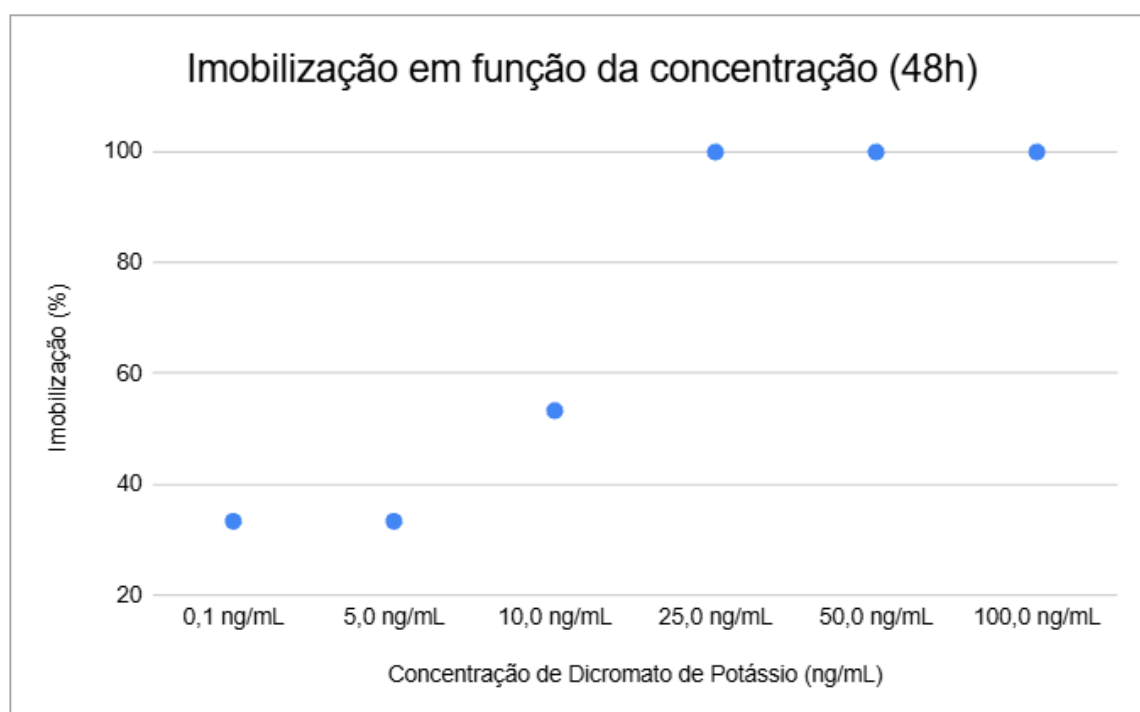
A partir dos dados de imobilização observados, a CE_{50} (24h) foi estimada por interpolação linear entre as concentrações que apresentaram imobilização próxima de 50%, resultando em 12,8 ng/mL. Esse resultado indica elevada sensibilidade do cultivo ao dicromato de potássio, característica esperada para populações biologicamente sensíveis (Gopi et al., 2012). Nas concentrações mais elevadas, a imobilização aproximou-se de 100%, confirmando a ação aguda do composto.

Após 48 horas de exposição, observou-se a intensificação dos efeitos tóxicos cumulativos do dicromato de potássio sobre as *Daphnias*, conforme apresentado na Tabela 8 e na Figura 5.

Tabela 8 – Imobilização acumulada após 48 horas de exposição

Concentração	Imobilização da daphnias após 48 horas			
	Tubo 1	Tubo 2	Tubo 3	% de imobilização
0,1 ng/mL	1	2	2	33,3
5 ng/mL	2	2	1	33,3
10 ng/mL	2	4	2	53,3
25 ng/mL	5	5	5	100,0
50 ng/mL	5	5	5	100,0
100 ng/mL	5	5	5	100,0
Controle Negativo	1	-	-	6,6

Fonte: Autoria própria (2025).

Figura 5 – Gráfico de Imobilização 48 horas

Fonte: Autoria própria (2025).

A CE_{50} (48h) estimada foi de 9,2 ng/mL, valor inferior ao observado em 24 horas, indicando intensificação dos efeitos tóxicos cumulativos com o aumento do

tempo de exposição, e consequentemente, maior sensibilidade dos organismos. Assim como observado em 24 horas, nas maiores concentrações a imobilização aproximou-se de 100%, confirmando o efeito agudo e imediato do dicromato de potássio.

De acordo com a diretriz OECD TG 202, um ensaio de toxicidade aguda com *Daphnia magna* é considerado válido quando a imobilização observada no controle negativo não excede 10% ao final do teste e quando as condições físico-químicas do meio permanecem dentro dos limites estabelecidos ao longo do experimento. No presente estudo, esses critérios foram plenamente atendidos, uma vez que o controle negativo apresentou imobilização inferior a 10% tanto em 24 quanto em 48 horas, além da manutenção adequada do pH e da temperatura durante todo o período experimental.

Portanto, os resultados obtidos confirmam a elevada sensibilidade do cultivo de *Daphnia magna* mantido em laboratório, validando seu uso em ensaios ecotoxicológicos e fornecendo uma base confiável para a aplicação do modelo biológico em estudos de avaliação de risco ambiental.

6 PERSPECTIVAS FUTURAS

Como perspectivas futuras, recomenda-se a realização de ensaios ecotoxicológicos como os testes de imobilização aguda e o teste de reprodução crônico (OECD TG 202 e 211) utilizando algum dos contaminantes emergentes incluídos no banco de dados, bem como a avaliação de misturas desses compostos e assim, contribuindo para uma avaliação mais abrangente dos riscos associados à sua presença em ambientes aquáticos.

7 CONCLUSÃO

Os resultados obtidos indicam que o estabelecimento do cultivo de *Daphnia magna* no laboratório de toxicologia foi bem-sucedido. Após a identificação e superação dos desafios relacionados ao manejo e à alimentação dos organismos, foram obtidas populações estáveis de neonatos, adequadas para aplicação no ensaio de imobilização aguda.

O teste de imobilização aguda com dicromato de potássio atendeu integralmente aos critérios de aceitação estabelecidos pela diretriz OECD TG 202, sendo, portanto, considerado válido. Os valores de CE_{50} obtidos, de 12,8 ng/mL em 24 horas e 9,2 ng/mL em 48 horas, confirmaram a elevada sensibilidade dos organismos cultivados, validando sua aplicabilidade em ensaios ecotoxicológicos futuros.

Em relação ao banco de dados, foram compiladas 615 substâncias, organizadas em cinco categorias (PPCPs, PFAS, EDCs, pesticidas e seus subprodutos e contaminantes orgânicos). Para cada composto, foram inseridas informações sobre a fórmula molecular e parâmetros analíticos essenciais, incluindo modo de ionização, íon precursor, íons produto e tempo de retenção. A verificação individual dos íons precursores por meio do *software* Xcalibur contribuiu para aumentar a confiabilidade às informações consolidadas. Dessa forma, o banco constitui uma ferramenta de suporte para análises futuras por LC-HRMS empregando a abordagem de *suspect screening*, em amostras ambientais de água.

Nesse contexto, a integração entre o banco de dados analítico e os bioensaios padronizados estabelece uma base metodológica sólida para estudos futuros, contribuindo para o fortalecimento das estratégias de monitoramento ambiental e avaliação de risco de contaminantes emergentes em ambientes aquáticos.

8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. *NBR 12713*: Ecotoxicologia aquática — Toxicidade aguda — Método de ensaio com *Daphnia* spp. (Crustacea, Cladocera). Rio de Janeiro: ABNT, 2016.

ALCON. *Labcon Test Nitrito*. Florianópolis: Alcon, 2020. Disponível em: <https://alconpet.com.br/pt/produto/labcon-test-nitrito>. Acesso em: 20 fev. 2026.

ALAMPANOS, V. D.; LAMBROPOULOU, D. A. Non-target screening using LC-HRMS: fundamentals, key aspects, and application to identify transformation products of organic contaminants in the environment. *The Handbook of Environmental Chemistry*, v. 138, p. 177-194, 2024. DOI: https://doi.org/10.1007/698_2024_1098

ALBUQUERQUE, M. V. da C.; DIAS, J.; BATISTA, F. R. da C.; OLIVEIRA, E. M. A.; SILVA, M. C. C. de P. e; RODRIGUES, R. M. M.; LEITE, V. D.; LOPES, W. S. *Daphnias* spp. as bioindicator organisms of toxicity and environmental characterization of eutrophized aquatic systems. *Revista Observatorio de la Economía Latinoamericana*, v. 21, n. 10, p. 17419-17431, 2023. DOI: <https://doi.org/10.55905/oelv21n10-156>

AUS DER BEEK, T.; WEBER, F.-A.; BERGMANN, A.; HICKMANN, S.; EBERT, I.; HEIN, A.; KÜSTER, A. Pharmaceuticals in the environment: global occurrences and perspectives. *Environmental Toxicology and Chemistry*, v. 35, n. 4, p. 823–835, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1002/etc.3339>

BELHAMZAoui, K.; DJEBAR, M.-R.; TICHATI, L.; MERIEM, L. S.; BERREBBAH, H.; ROUABHI, R. Response against ethinyl estradiol and levonorgestrel of *Daphnia magna*: immobilization and oxidative stress assessment. *Journal of Chemical Health Risks*, v. 13, n. 6, p. 145–157, 2023. Disponível em: <https://www.jchr.org/index.php/JCHR/article/view/1483>. Acesso em: 19 fev. 2026.

BOAHEN E.; OWUSU, L.; ADJEI-ANIM, S. O. A comprehensive review of emerging environmental contaminants of global concern. *Discover Environment*, v. 3, n. 1, 2025. DOI: <https://doi.org/10.1007/s44274-025-00259-x>

BRANDELERO, S. M; SIQUEIRA, E. Q; LIMA, A. C. B.; et al. Desoxigenação em água superficial de ambiente lótico. *Revista Ambiente & Água*, v. 5, n. 1, 2010. DOI: <https://doi.org/10.4136/ambi-agua.127>

BRASIL. Ministério da Saúde. Portaria GM/MS nº 888, de 4 de maio de 2021. *Diário Oficial da União*, Brasília, DF, 2021. Disponível em: <https://in.gov.br/en/web/dou/-/portaria-gm/ms-n-888-de-4-de-maio-de-2021-318461562>. Acesso em: 19 fev. 2026.

BRASIL. Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA). Resolução nº 357, de 17 de março de 2005. Dispõe sobre a classificação dos corpos de água e diretrizes ambientais para o seu enquadramento. *Diário Oficial da União*, Brasília, DF, 2005.

BRASIL. Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA). Resolução nº 430, de 13 de maio de 2011. Dispõe sobre condições e padrões de lançamento de efluentes. *Diário Oficial da União*, Brasília, DF, 2011.

ČELIĆ, M.; JAÉN-GIL, A.; BRICEÑO-GUEVARA, S.; RODRÍGUEZ-MOZAZ, S.; GROS, M.; PETROVIĆ, M. Extended suspect screening to identify contaminants of emerging concern in riverine and coastal ecosystems and assessment of environmental risks. *Journal of Hazardous Materials*, v. 404, p. 124102, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2020.124102>

CHEMRADAR. *ChemRadar – Global Chemical Compliance and Inventory Database*. [s. l.], [s. d.]. Disponível em: <https://www.chemradar.com/tools/cis/inv/648973cfbc1d7cdaf02f0ad1>. Acesso em: 22 fev. 2026.

CHIAIA-HERNÁNDEZ, A. C.; SCHERINGER, M.; MULLER, A.; STIEGER, G.; WACHTER, D.; KELLER, A.; PINTADO-HERRERA, M. G.; LARA-MARTIN, P. A.;

BUCHELI, T. D.; HOLLENDER, J. Target and suspect screening analysis reveals persistent emerging organic contaminants in soils and sediments. *Science of The Total Environment*, v. 740, p. 140181, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.140181>

CHINA. Ministry of Ecology and Environment. 2023年版重点管控新污染物清单 [Lista de Novos Poluentes de Controle Prioritário (Edição 2023)]. Pequim: MEE, 2022a. 1 arquivo PDF (6 p.). Disponível em: <https://www.mee.gov.cn/xxgk2018/xxgk/xxgk02/202212/W020221230613338823204.pdf>. Acesso em: 24 fev. 2026

CHINA. 2023年版重点管控新污染物清单将于3月1日起施行 [Lista de Novos Poluentes de Controle Chave (Edição 2023) entrará em vigor em 1º de março]. Portal do Governo da República Popular da China, Pequim, 26 jan. 2023. Disponível em: https://www.gov.cn/xinwen/2023-01/26/content_5738752.htm. Acesso em: 24 fev. 2026.

CHINA. State Council of the People's Republic of China. *State Council guideline on newly emerged pollutants control*. Beijing, 24 maio 2022b. Disponível em: https://english.www.gov.cn/policies/latestreleases/202205/24/content_WS628cd024c6d02e533532b3e1.html. Acesso em: 24 fev. 2026.

COMISSÃO EUROPEIA. *Decisão de Execução (UE) 2020/1161, de 4 de agosto de 2020. Estabelece uma lista de observação de substâncias para monitoramento em toda a União no âmbito da política da água*. Jornal Oficial da União Europeia, Bruxelas, 2020. Disponível em: http://data.europa.eu/eli/dec_impl/2020/1161/oj. Acesso em: 19 fev. 2026.

COMISSÃO EUROPEIA. *Decisão de Execução (UE) 2022/1307, de 22 de julho de 2022. Estabelece uma lista de observação de substâncias para monitoramento em toda a União no âmbito da política da água*. Jornal Oficial da União Europeia, Bruxelas,

2022. Disponível em: http://data.europa.eu/eli/dec_impl/2022/1307/oj. Acesso em: 19 fev. 2026.

COMISSÃO EUROPEIA. *Decisão de Execução (UE) 2025/439, de 28 de fevereiro de 2025. Estabelece uma lista de observação de substâncias para monitoramento em toda a União no âmbito da política da água*. Jornal Oficial da União Europeia, Bruxelas, 2025. Disponível em: http://data.europa.eu/eli/dec_impl/2025/439/oj. Acesso em: 19 fev. 2026.

CONSELHO DA UNIÃO EUROPEIA. *Poluição da água: Conselho e Parlamento chegam a acordo provisório para atualizar as substâncias prioritárias nas águas subterrâneas e de superfície*. Bruxelas, 23 set. 2025. Comunicado de imprensa. Disponível em: <https://www.consilium.europa.eu/pt/press/press-releases/2025/09/23/water-pollution-council-and-parliament-reach-provisional-deal-to-update-priority-substances-in-surface-and-ground-waters/>. Acesso em: 19 fev. 2026.

COUNCIL OF THE EUROPEAN UNION. *Water pollution: Council and Parliament reach provisional deal to update priority substances in surface and ground waters*. [S. l.], 23 set. 2025. Disponível em: <https://www.consilium.europa.eu/en/press/press-releases/2025/09/23/water-pollution-council-and-parliament-reach-provisional-deal-to-update-priority-substances-in-surface-and-ground-waters/>. Acesso em: 19 fev. 2026.

CHUNTAPA, B.; POWTONGSOOK, S.; MENASVETA, P. Water quality control using *Spirulina platensis* in shrimp culture tanks. *Aquaculture*, v. 220, n. 1-4, p. 355-366, 2003. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0044-8486\(02\)00428-3](https://doi.org/10.1016/S0044-8486(02)00428-3).

EBERT, D. *Daphnia as a versatile model system in ecology and evolution*. *EvoDevo*, v. 13, art. 16, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1186/s13227-022-00199-0>

EUROPEAN COMMISSION. *Drinking water*. European Commission – Environment. Disponível em: https://environment.ec.europa.eu/topics/water/drinking-water_en. Acesso em: 19 fev. 2026.

EUROPEAN COMMISSION. *Water Framework Directive*. Disponível em: https://environment.ec.europa.eu/topics/water/water-framework-directive_en. Acesso em: 19 fev. 2026.

GRANDJEAN, P.; LANDRIGAN, P. J. Neurobehavioural effects of developmental toxicity. *Lancet Neurol.*, v. 13, n. 3, p. 330-338, 2014. DOI: [https://doi.org/10.1016/s1474-4422\(13\)70278-3](https://doi.org/10.1016/s1474-4422(13)70278-3)

GIL, M. J. et al. Contaminantes emergentes en aguas, efectos y posibles tratamientos. *Producción + Limpia*, v. 7, n. 2, p. 52-73, 2012. Disponível em: http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1909-04552012000200005. Acesso em: 19 fev. 2026.

GOPI, R. A. et al. Effect of potassium dichromate on the survival and reproduction of *Daphnia magna*. *Bulletin of Environment, Pharmacology and Life Sciences*, v. 1, n. 7, p. 89–94, jun. 2012. Disponível em: https://www.researchgate.net/publication/295073705_Effect_of_Potassium_Dichromate_on_the_Survival_and_Reproduction_of_Daphnia_magna. Acesso em: 19 fev. 2026.

GUST, K. A.; KENNEDY A. J.; LAIRD J. G.; WILBANKS M. S.; BARKER N. D.; GUAN X.; MELBY N. L.; BURGOON L. D.; KJELLAND M. E.; SWANNACK T. M. Different as night and day: Behavioural and life history responses to varied photoperiods in *Daphnia magna*. *Molecular Ecology*, v. 28, n. 19, p. 4422–4438, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1111/mec.15230>

GÜROY, B.; GÜROY, D.; BİLEN, S.; KENANOĞLU, O. N.; ŞAHİN, İ.; TERZİ, E.; KARADAL, O.; MANTOĞLU, S. Effect of dietary *Spirulina* (*Arthrospira platensis*) meal on growth performance, immune-related gene expression and resistance to *Vibrio*

anguillarum in European seabass (*Dicentrarchus labrax*). *Aquaculture Research*, v. 53, n. 9, p. 3316–3329, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1111/are.15745>.

HALUCH, S. M.; HALUCH, F. C.; LEMES, J. D.; FROEHNER, S. J. Ecotoxicidade de antibióticos e anestésicos de amplo uso frente ao bioindicador *Daphnia magna*. *Revista ft*, v. 27, ed. 122, 2023. DOI: <https://doi.org/10.5281/zenodo.7991973>

HOLLENDER, J.; SCHYMANSKI, E. L.; SINGER, H. P.; FERGUSON, P. L. Nontarget screening with high resolution mass spectrometry in the environment: ready to go? *Environmental Science & Technology*, v. 51, n. 20, p. 11505–11512, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.est.7b02184>

HOLLENDER, J. et al. NORMAN guidance on suspect and non-target screening in environmental monitoring. *Environmental Sciences Europe*, v. 35, n. 1, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1186/s12302-023-00779-4>

HOLLENDER, J. et al. High-resolution mass spectrometry-based non-target screening can support regulatory environmental monitoring and chemicals management. *Environmental Sciences Europe*, v. 31, n. 1, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1186/s12302-019-0225-x>

JARVIS, A. L.; BERNOT, M. J.; BERNOT, R. J. The effects of the psychiatric drug carbamazepine on freshwater invertebrate communities and ecosystem dynamics. *Science of The Total Environment*, v. 496, p. 461–470, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2014.07.084>

KHANGAROT, B. S.; RAY, P. K. Investigation of correlation between physicochemical properties of metals and their toxicity to the water flea *Daphnia magna* Straus. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, v. 18, n. 2, p. 109-120, 1989. DOI: [https://doi.org/10.1016/0147-6513\(89\)90071-7](https://doi.org/10.1016/0147-6513(89)90071-7)

LEITE, A. R. B. *Avaliação de efeitos toxicológicos em Daphnia magna expostos a misturas de contaminantes de preocupação emergente sob a influência de gradientes*

de temperatura. 2024. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) – Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2024. Acesso em: 5 fev. 2026.

MACEDO, S.; TEIXEIRA, E.; GASPAR, T. B.; BOAVENTURA, P.; SOARES, M. A.; MIRANDA-ALVES, L.; SOARES, P. Endocrine-disrupting chemicals and endocrine neoplasia: a forty-year systematic review. *Environmental Research*, v. 218, 114869, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.envres.2022.114869>

MIYABARA, M. H.; SCHMIDT, F.; BFONSECA, R. C. Método AHP: tomada de decisão para metodologias de determinação de contaminantes emergentes em águas superficiais. *Revista Virtual de Química*, v. 13, n. 6, p. 1414–1430, 2021. DOI: <https://doi.org/10.21577/1984-6835.20210080>.

MONTAGNER, C. C.; VIDAL, C.; ACAYABA, R. Contaminantes emergentes em matrizes aquáticas do Brasil: cenário atual e aspectos analíticos, ecotoxicológicos e regulatórios. *Química Nova*, São Paulo, v. 40, n. 9, p. 1094–1110, 2017. DOI: <https://doi.org/10.21577/0100-4042.20170091>

MONTAGNER, C. C.; SODRÉ, F. F.; ACAYABA, R. D.; VIDAL, C.; CAMPESTRINI, I.; LOCATELLI, M. A.; PESCARA, I. C.; ALBUQUERQUE, A. F.; UMBUZEIRO, G. A.; JARDIM, W. F. Ten years-snapshot of the occurrence of emerging contaminants in drinking, surface and ground waters and wastewaters from São Paulo State, Brazil. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, Campinas, v. 30, n. 3, p. 614–632, 2019. DOI: <https://doi.org/10.21577/0103-5053.20180232>

MORIN-CRINI, N et al. Worldwide cases of water pollution by emerging contaminants: a review. *Environmental Chemistry Letters*, Cham, v. 20, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10311-022-01447-4>

MORO, O. M. de P.; FREITAS, A. M. de. Avaliação da ecotoxicidade aguda em *Daphnia magna*: ensaio de sensibilidade. In: SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA DA UTFPR – SICITE 2020, Curitiba. *Anais [...]*.

Curitiba: Universidade Tecnológica Federal do Paraná, 2020. Disponível em: <https://eventos.utfpr.edu.br/sicite/sicite2020>. Acesso em: 18 fev. 2026.

NOWAKOWSKI, K.; SŁUGOCKI, Ł. Short-term heat shock perturbation affects populations of *Daphnia magna* and *Eurytemora carolleeae*: a warning to water thermal pollution. *Scientific Reports*, [S. l.], v. 11, n. 1, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41598-021-96464-8>

OLIVEIRA, D. M. de.; AGOSTINETTO, L.; SIEGLOCH, A. E. Comparison of the drinking water standard for pesticides of Brazil with other countries. *Heliyon*, Amsterdam, v. 9, e13783, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e13783>

OLVERA-NOVOA, M. A.; DOMÍNGUEZ-CEN, L. J.; CASTILLO, L. O.; MARTÍNEZ-PALACIOS, C. A. Effect of the use of the microalga *Spirulina maxima* as fish meal replacement in diets for tilapia, *Oreochromis mossambicus* (Peters), fry. *Aquaculture Research*, v. 29, n. 10, p. 709–715, 1998. DOI: <https://doi.org/10.1046/j.1365-2109.1998.29100709.x>

ORGANISATION FOR ECONOMIC CO-OPERATION AND DEVELOPMENT. *Test No. 202: Daphnia sp. acute immobilisation test*. OECD Guidelines for the Testing of Chemicals, Section 2. Paris: OECD Publishing, 2004. DOI: <https://doi.org/10.1787/9789264069947-en>

ORGANISATION FOR ECONOMIC CO-OPERATION AND DEVELOPMENT. *Test No. 211: Daphnia magna reproduction test*. OECD Guidelines for the Testing of Chemicals, Section 2. Paris: OECD Publishing, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1787/9789264185203-en>

PESSOA, G. P.; SILVEIRA, P. M.; SOUSA, M. R.; COSTA, N. C. S.; SANTOS, A. B. Utilização de testes de ecotoxicidade na análise da eficiência de estações de tratamento de esgoto utilizando *Daphnia magna* como bioindicador. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA SANITÁRIA E AMBIENTAL, 26., 2019, Rio de Janeiro. *Anais...* Rio de Janeiro: ABES, 2019. Disponível em: <https://abes->

dn.org.br/anaisletronicos/19_Download/TrabalhosCompletoPDF/II-076.pdf. Acesso em: 19 fev. 2026.

RIBEIRO, O. M.; PINTO, M. Q.; RIBEIRO, C.; TIRITAN M. E.; CARROLA J. S. A dáfnia como sensor da ecotoxicidade. *Revista de Ciência Elementar*, v. 9, n. 2, 2021. DOI: <http://doi.org/10.24927/rce2021.044>

RICHARDSON, S. D.; TERNES, T. A. Water analysis: emerging contaminants and current issues. *Analytical Chemistry*, v. 89, n. 1, p. 546-578, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.7b04577>

SAETCHNIKOV, A.; TCHERNIAVSKAIA, E. A.; SAETCHNIKOV, V. A.; OSTENDORF A. Detection of per- and polyfluoroalkyl water contaminants with a multiplexed 4D microcavities sensor. *Photonics Research*, v. 11, n. 11, 2023. DOI: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2306.08908>

SANTANA, J. da S. *Determinação de contaminantes emergentes em mananciais de água bruta e na água para consumo humano do Distrito Federal*. 2013. Dissertação (Mestrado em Química) – Universidade de Brasília, Instituto de Química, Programa de Pós-Graduação em Química, Brasília, 2013. Disponível em: <http://repositorio.unb.br/handle/10482/13822>. Acesso em: 19 fev. 2026.

SCIENCE PHOTO LIBRARY. *Water flea (Daphnia magna)*. [s. l.], 2025. Fotografia. Disponível em: <https://www.sciencephoto.com/media/367262/view/water-flea-daphnia-magna-commute>. Acesso em: 20 fev. 2026.

SCHYMANSKI, E. L.; JEON, J.; GULDE, R.; FENNER, K.; RUFF, M.; SINGER, H. P.; HOLLENDER, J. Identifying small molecules via high resolution mass spectrometry: communicating confidence. *Environmental Science & Technology*, v. 48, n. 4, p. 2097-2098, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1021/es5002105>

SILVA, A. R. R.; GONÇALVES, S. F.; PAVLAKI, M. D.; MORGADO, R. G.; SOARES, A. M. V. M.; LOUREIRO, S. Mixture toxicity prediction of substances from different

origin sources in *Daphnia magna*. *Chemosphere*, v. 292, 133432, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.133432>

SILVA, J. W. A. da; SANTOS, M. J. B. dos; BEZERRA, J. H. C.; DAMASCENO, V. L.; ARAUJO, G. S.; SANTOS, E. S. dos; MOREIRA, R. T.; LOPES, D. N. M. Avaliação da toxicidade da amônia em um policultivo do *Litopenaeus vannamei* e *Spirulina platensis*. *Brazilian Journal of Development*, v. 6, n. 2, p. 5615-5623, 2020. DOI: <https://doi.org/10.34117/bjdv6n2-020>

SOARES, A. F. S.; LEÃO, M. M. D. Contaminação dos mananciais por micropoluentes e a precária remoção desses contaminantes nos tratamentos convencionais de água para potabilização. *De Jure – Revista Jurídica do Ministério Público de Minas Gerais*, v. 14, n. 24, 2018. Disponível em: <https://dejure.mpmg.mp.br/dejure/article/view/70>. Acesso em: 19 fev. 2026.

SUNDERLAND, E. M.; HU, X. C.; DASSUNCAO, C.; TOKRANOV, A. K.; WAGNER, C. C.; ALLEN, J. G. A review of the pathways of human exposure to poly- and perfluoroalkyl substances (PFASs) and present understanding of health effects. *Journal of Exposure Science & Environmental Epidemiology*, v. 29, n. 2, p. 131–147, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41370-018-0094-1>

SAETCHNIKOV, A.; TCHERNIAVSKAIA, E.; SAETCHNIKOV, V. A.; OSTENDORF, A. Detection of per- and polyfluoroalkyl water contaminants with a multiplexed 4D microcavities sensor. *Photonics Research*, v. 11, n. 11, p. A88-88, 2023. DOI: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2306.08908>

WAGNER, Nicole D.; SIMPSON, André J.; SIMPSON, Myrna J. Metabolomic responses to sublethal contaminant exposure in neonate and adult *Daphnia magna*. *Environmental Toxicology and Chemistry*, v. 36, n. 4, p. 938-946, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1002/etc.3604>

YUAN, S.; LIANG, C.; LI, W.; LETCHER, R. J.; LIU, C. A comprehensive system for detection of behavioral change of *D. magna* exposed to various chemicals. *Journal of*

Hazardous Materials, v. 402, p. 123731, jan. 2021. DOI:
<https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2020.123731>

APÊNDICE A – BANCO DE DADOS DE CONTAMINATES EMERGENTES UTILIZADOS NO ESTUDO

Tabela A1 – Substâncias da classe PPCPs presentes no banco de dados de contaminantes emergentes

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produtos					Tempo de retenção
Carbaryl	C12H11NO2	Positivo	202	145,064	146,0672	202,0846	117,0688		7,440 min
Desvenlafaxine	C16H25NO2	Positivo	264	264,196	246,1851	265,1992	247,1879	266,202	4,8 min
Fluconazole	C13H12F2N6O	Negativo	305	191,069	68,0256	94,04117	108,02077	222,049	10,4709 min
Permethrin	C21Cl2H20O3	Positivo	391	149,023	167,0338	71,0854	355,1093	183,080	18,0 min
Erythromycin	C37H67NO13	—	—	—	—	—	—	—	—
Mestranol	C21H26O2	Positivo	311,2006	121,064	91,0541	77,0411	78,0483	65,0431	14,544 min
Paracetamol/ Acetaminophen	C8H9NO2	Positivo		152,0708	110,06029	93,03372	92,04984	65,03873	6,4518 min
Loratadine	C22H23ClN2O2	Positivo	383,1521	383,1537	385,1496	337,1096	—	—	11,735 min
Promethazine	C17H20N2S	Positivo	285,142	285,1417	286,1445	240,083	198,0355	287,1391	7,344 min
Amoxicillin	C16H19N3O5S	Negativo	364,0973	223,0546	206,0298	320,1064	129,0124	93,037	4,706 min
Cefalexin	C16H17N3O4S	Positivo	348,1013	158,0278	174,0556	192,0481	106,0663	175,0587	4,2 min
Ciprofloxacin	C17H18FN3O3	Positivo	332,1405	332,1399	333,1445	149,0584	288,1497	—	4,380 min
Clarithromycin	C38H69NO13	Positivo	—	158,11766	83,04971	72,08175	590,39197	116,10716	16,3377 min
Enoxacin	C15H17FN4O3	Positivo	321,1357	321,1358	277,146	303,1241	257,1398	234,104	4,2 min
Enrofloxacin	C19H22FN3O3	Positivo	360,1718	360,172	361,175	316,1819	318,1616	—	4,530 min
Linezolid	C16H20FN3O4	Positivo	338,1511	338,1508	296,1404	235,124	294,1607	195,0927	5,6 min
Norfloxacin	C16H18FN3O3	—	—	320,14	321,1431	322,1449	302,1291	276,1486	4,280 min
Sulfamethoxazole	C10H11N3O3S	Positivo	—	254,05954	108,04476	92,04968	156,01146	65,03874	8,4503 min

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produtos					Tempo de retenção
Tetracycline	C22H24N2O8	Positivo	445,1605	427,1501	410,1235	445,1607	428,1341	154,0497	4,8 min
Trimethoprim	C14H18N4O3	Positivo	—	291,14633	123,06696	261,099	229,10901	257,10446	9,6574 min
Metformin	C4H11N5	Positivo	—	130	131	—	—	—	2,300 min
Atenolol	C14H22N2O3	—	—	267,17108	145,06488	56,04987	74,06006	133,0649	7,1676 min
Diltiazem	C22H26N2O4S	Positivo	415,1686	178,0323	150,0374	109,0108	72,0808	137,0599	7,3 min
Losartan	C22H23ClN6O	Positivo	—	207,09201	377,15393	205,07668	405,15714	180,08095	14,9868 min
Propanolol	C16H21NO2	Positivo	260,1645	260,1642	261,1672	262,1701	183,0788		6,335 min
Atorvastatin	C33H35FN2O5	Positivo	559,2603	440,2282	441,2316	292,1528	250,1046	380,1691	10,2 min
Bezafibrate	C19H20ClNO4	Positivo	362,1154	362,1152	316,1097	364,1109	363,119	276,0775	8,968 min
Gemfibrozil	C15H22O3	Positivo	251,1642	129,0901	233,1532	205,1577	123,0797	130,0943	11,905 min
Triclosan	C12H7Cl3O2	Negativo	286,9439	34,9692	141,9833	160,9568			13,802 min
Cimetidine	C10H16N6S	Positivo	253,123	253,1227	159,0697	117,048	95,0602	211,1011	2,0 min
Omeprazole	C17H19N3O3S	Positivo	346,122	198,058	346,1221	168,1017	151,0987	199,0611	7,5 min
Ranitidine	C13H22N4O3S	Positivo	315,1485	176,0478	224,0972	270,0902	315,1481	316,1507	3,2 min
Acyclovir	C8H11N5O3	Positivo	226,0935	226,0935	227,0974	—	—	—	4,731 min
4—Nonylphenol	C15H24O	Negativo	219,1754	219,1758	—	—	—	—	6,203 min
4—Octylphenol	C14H22O	Negativo	205,1598	205,1605	—	—	—	—	5,817 min
Acetylsalicylic acid	C9H8O4	Negativo	179,035	110,0243	113,0349	—	—	—	8,412 min
Diclofenac	C14H11Cl2NO2	Positivo		214,04112	214,04071	250,01779	215,04993	278,01395	15,3466 min
Ibuprofen	C13H18O2	Negativo	205,1235	80,91701	111,00969	111,00827	204,96504	87,00908	16,0738 min
Ketoprofen	C16H14O3	Positivo	255,1016	255,0978	209,093	256,1003	210,0917		8,4 min
Naproxen	C14H14O3	Negativo		185	170	229	186	230	16,300 min

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produtos					Tempo de retenção
Betamethasone	C22H29FO5	Positivo	393	355,191	373,2013	337,1802	279,174	319,169	9,016 min
Dexamethasone	C22H29FO5	Positivo	393	149,022	393,2083	373,2021	167,032	355,190	8,3 min
Prednisone	C21H26O5	Positivo	359	359,188	341,1769	360,1908	313,1801	342,180	7,161 min
Ibuprofen	C13H18O2	Negativo	205,1235	80,91701	111,00969	111,00827	204,96504	87,00908	16,0738 min
Acetaminophen	C8H9NO2	Positivo		152,0708	110,06029	93,03372	92,04984	65,03873	6,4518 min
Gemfibrozil	C15H22O3	Positivo	251,1642	129,0901	233,1532	205,1577	123,0797	130,0943	11,905 min
Naproxen	C14H14O3	Negativo	—	185	170	229	186	230	16,300 min
Diclofenac	C14H11Cl2NO2	Positivo	—	214,041	214,04071	250,01779	215,04993	278,014	15,3466
4—OH—xilazina	—	Positivo	237	121,147	136,843	147,857	—	—	—
Ácido flufenamico	C14H10F3NO2	Positivo	282	167,143	244	264,071	—	—	—
Ácido meclofenamico	C14H11Cl2NO2	Positivo	296	178,111	180,125	208,054	—	—	—
Ácido mefenamico	C15H15NO2	Positivo	243	107,000	174,942	225	—	—	—
Ácido tolfenamico	C14H12ClNO2	Positivo	263	194,929	226,889	244,889	—	—	—
Ácido tranexamico	C8H15NO2	Positivo	158	67,111	93,111	95,111	—	—	—
Benzdamina	—	Positivo	310	58,169	86,111	265,111	—	—	—
Benzocaina	C9H11NO2	Positivo	166	94,111	120,071	138,054	—	—	—
Celecoxib	C17H14F3N3O2S	Positivo	382	281,040	282,111	362,04	—	—	—
Cetoprofeno	—	Positivo	255	77,111	105,058	177	—	—	—
Cetorolac	—	Positivo	256	77,040	105,071	178,054	—	—	—
Codeína	C18H21NO3	Positivo	300	152,111	165,04	215,111	—	—	—
Dibucaina	—	Positivo	344	116,071	215,071	271,111	—	—	—
Diclofenaco	C14H11Cl2NO2	Positivo	296	179,071	214	215	—	—	—

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produtos					Tempo de retenção
Diidrocodeína	C18H23NO3	Positivo	302	171,040	199,111	201,111	—	—	—
Dipirona metab (MAA)	—	Positivo	218	56,183	97,111	187,04	—	—	—
Fenacetina	C10H13NO2	Positivo	180	93,058	110,04	138,111	—	—	—
Fenazona	C11H12N2O	Positivo	189	77,111	131,058	147,111	—	—	—
Fenilbutazona	C19H20N2O2	Positivo	309	120,071	160,04	188,111	—	—	—
Firocoxibe	C17H20O5S	Positivo	304	107,040	135,111	286,111	—	—	—
Flunixinina	—	Positivo	297	210,054	236,071	259,071	—	—	—
Indometacina	C19H16ClNO4	Positivo	358	111,000	139,071	174,111	—	—	—
Lidocaina	C14H22N2O	Positivo	235	30,262	58,111	86,111	—	—	—
Nalorfina	C19H21NO3	Positivo	312	152,040	165,111	201,04	—	—	—
Naproxeno	C14H14O3	Positivo	231	141,111	152,111	153,111	—	—	—
Nimesulida	C13H12N2O5S	Negativo	307	122,040	198,04	229,071	—	—	—
OH—mepivacaina	—	Positivo	263	70,111	98,111	166,04	—	—	—
Orfenadrina	C18H23NO	Positivo	270	141,040	165,111	166,054	—	—	—
Oxifembutazona	—	Positivo	325	119,986	147,986	203,986	—	—	—
PI 7—propilteofilina	—	Positivo	223	181,000	—	—	—	—	—
Procaina	C13H20N2O2	Positivo	237	100,111	120,054	164,054	—	—	—
Salicilamida	C7H7NO2	Positivo	138	65,111	93,058	121,054	—	—	—
Temazepam	C16H13ClN2O2	Positivo	301	177,071	193,111	—	—	—	—
Tenoxicam	C13H11N3O4S2	Positivo	338	95,058	121	164,129	—	—	—
Terbutalina	C12H19NO3	Positivo	226	152,071	—	—	—	—	—
Tetracaina	C15H24N2O2	Positivo	265	72,111	92,04	176,111	—	—	—

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produtos					Tempo de retenção
Tolmetina	C15H15NO3	Positivo	258	65,111	91,04	119,071	—	—	—
Xilazina	C12H16N2S	Positivo	221	90,040	147,111	164,071	—	—	—
7B—OH—etilteofilina	—	Positivo	225	96,040	124	181,054	—	—	—
Alprazolam	C17H13ClN4	Positivo	309	205,054	274,04	281	—	—	—
Atropina	C17H23NO3	Positivo	290	91,040	93,04	124,111	—	—	—
Benzdamina	—	Positivo	310	58,169	86,111	265,111	—	—	—
Bromexina	C14H20Br2N2	Positivo	375	114,111	182,96	261,817	—	—	—
Cafeína	C8H10N4O2	Positivo	195	42,222	83,111	110,04	—	—	—
Capsaicina	C18H27NO3	Positivo	306	94,058	122,071	137,054	—	—	—
carbazocromo	C10H12N4O3	Positivo	237	118,111	164,071	220,071	—	—	—
Cimetidina	C10H16N6S	Positivo	253	95,040	117,111	159,111	—	—	—
Ciproheptadina	C21H21N	Positivo	288	191,040	202,058	215,04	—	—	—
Clonazepam	C15H10ClN3O3	Positivo	316	214,000	241	269,982	—	—	—
Clordiazepoxido	C16H14ClN3O	Positivo	300	227,000	282,097	283,054	—	—	—
Clorfeniramina	C16H19ClN2	Positivo	275	167,111	201,071	230,058	—	—	—
Difilina	—	Positivo	255	96,058	124,04	181,111	—	—	—
Diisopiramida	—	Positivo	340	194,111	195,111	239,111	—	—	—
Enalapril	C20H28N2O5	Positivo	377	160,040	234,183	303,183	—	—	—
Fenilbutazona	C19H20N2O2	Positivo	309	120,000	160	188	—	—	—
Fenoterol	C17H21NO4	Positivo	304	107,040	135,111	286,111	—	—	—
Flunarizina	C26H26F2N2	Positivo	405	183,040	201,071	203,058	—	—	—
Flunixina	—	Positivo	297	210,070	236	259	—	—	—

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produtos					Tempo de retenção
Fluoxetina	C17H18F3NO	Positivo	310	44,151	148,111	183,054	—	—	—
Glicopirrolato	—	Positivo	318	58,111	88,111	116,111	—	—	—
Guainafezin	—	Positivo	199	125,111	151,058	163,111	—	—	—
Guanabenz	C8H8Cl2N4	Positivo	231	100,000	136	144,929	—	—	—
Hidroxizina	C21H27ClN2O2	Positivo	375	165,040	166,111	201,054	—	—	—
Ipratropium	C20H30NO3+	Positivo	332	124,111	166,165	290,183	—	—	—
Lamotrigina	C9H7Cl2N5	Positivo	256	144,929	159	211	—	—	—
Levamisol	C11H12N2S	Positivo	205	91,040	123	178,04	—	—	—
Metocarbamol	C11H15NO5	Positivo	242	118,111	163,058	199,129	—	—	—
Midazolam	C18H13ClFN3	Positivo	326	223,125	249,04	291,111	—	—	—
Nalbufina	C21H27NO4	Positivo	358	254,111	272,111	340,222	—	—	—
Norfloxacino	C16H18FN3O3	Positivo	320	205,054	233,111	276,183	—	—	—
OH—etil promazina sulfoxido	—	Positivo	345	242,000	243,054	282,111	—	—	—
Olodaterol	C21H26N2O5	Positivo	387	121,100	163,183	190,071	—	—	—
Oxazepam	C15H11ClN2O2	Positivo	287	104,071	231,071	241,071	—	—	—
Oxifembutazona	—	Positivo	325	119,900	147,9	203,98	—	—	—
Pentoxifilina	C13H18N4O3	Positivo	279	99,111	138,111	181,111	—	—	—
Procainamida	C13H21N3O	Positivo	236	92,040	120,071	163,111	—	—	—
Promazina	C17H20N2S	Positivo	285	86,111	179,982	212	—	—	—
Prometazina	C17H20N2S	Positivo	285	86,111	197,982	240,071	—	—	—
Ranitidina	C13H22N4O3S	Positivo	315	125,071	130,058	176,071	—	—	—

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produtos					Tempo de retenção
Sulfadiazina	C10H10N4O2S	Positivo	251	92,040	96,04	108,071	—	—	—
Terbutalina	C12H19NO3	Positivo	226	107,071	125	152,071	—	—	—
Trimetoprima	C14H18N4O3	Positivo	291	123,111	230,111	261,111	—	—	—
Tripelenamina	C16H21N3	Positivo	256	91,111	119,058	211,111	—	—	—
Zolpidem	C19H21N3O	Positivo	308	219,111	235,111	263,111	—	—	—
Fenobarbital	C12H12N2O3	Positivo	233	164,960	168,96	186,875	—	—	—
acepromazina	C19H22N2OS	Positivo	327	58,151	86,111	222,111	—	—	—
tetramisol	C11H12N2S	Positivo	205	91,111	117,111	123,04	—	—	—
salbutamol	C13H21NO3	Positivo	240	121,111	133,04	148,111	—	—	—
Gabapentina	C9H17NO2	Positivo	172	91,111	95,169	119,111	137,183	154,165	8 min
Teofilina	C7H8N4O2	Positivo	181	69,111	96,111	124,111	—	—	8 min
Fenoprofeno	C15H14O3	Positivo	243	104,111	178,111	179,097	181,125	197,111	8 min
Ambroxol	C13H18Br2N2O	Positivo	379	116,111	185	263,889	—	—	8 min
Benfluorex	C19H20F3NO2	Positivo	352	105,111	159,111	230,111	—	—	12,3
Bromantano	—	Positivo	306	67,111	79,111	93,111	—	—	0
Ciclazadona	—	Positivo	217	91,111	106,111	146,111	—	—	9,7
Clobenzorex	C16H18ClN	Positivo	260	91,111	119,111	125,054	—	—	10,2
Cropropamida	C13H24N2O2	Positivo	241	100,151	168,151	196,111	—	—	12,37
Crotetamida	C12H22N2O2	Positivo	227	86,151	154,183	182,111	—	—	10,17
Famprofazona	C24H31N3O	Positivo	378	91,000	119	162,165	—	—	14,69
Fembutrazato	—	Positivo	368	119,183	191,111	204,183	—	—	14,11
Mesocarb	C18H18N4O2	Positivo	323	91,000	119	177	—	—	15,2

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produtos					Tempo de retenção
Modafinil_Na+	—	Positivo	296	129,000	165,125	278	—	—	12,8
Morazona	C23H27N3O	Positivo	378	172,111	173,111	185,111	—	—	0
OH—bromantano	—	Positivo	322	91,111	133,151	151,111	—	—	16,27
Pipradol	C18H21NO	Positivo	268	130,111	144,111	167,111	—	—	7,99
p—OH—mesocarb	C18H18N4O6S	Positivo	339	91,111	108,111	135,111	—	—	12,05
b—metilfenetilamina	—	—	136	65,111	91,111	119,111	—	—	2,7
Dobutamina	C18H23NO3	—	302	107,111	137,111	166,111	—	—	5,05
Fenilefrina	C9H13NO2	—	168,10	150,09	168,10	109,06	119,04	135,06	0,9 min
Heptaminol	C8H19NO	—	146	69,169	111,169	128,151	—	—	1,3
Meclofenoxato	C12H16ClNO3	—	258	72,183	86,111	141,071	—	—	10
Metilfenidato	C14H19NO2	—	234	84,111	91,111		—	—	5
Octopamina	C8H11NO2	—	154	91,111	107,125	119,111	—	—	0,65
Prolintano	C15H23N	—	218	91,111	105,111	147,111	—	—	7,6
Etamivan	C12H17NO3	Positivo	224	108,040	123,04	151,071	—	—	9,97
Femproporex	C12H16N2	Positivo	189	65,111	91,111	119,111	—	—	2,62
Fendimetrazina	C12H17NO	Positivo	192	115,111	117,111	146,111	—	—	2,48
Flefedrona	—	Positivo	182	103,111	149,111	164,111	—	—	2,25
N—desmetilseleginina	—	Positivo	174	77,111	91,111	119,111	—	—	4,3
PI Reserpina (—)	C33H40N2O9	Negativo	607	592,222	—	—	—	—	10
PI Reserpina (+)	C33H40N2O9	Positivo	609	397,222	—	—	—	—	10
Seleginina	—	Positivo	188	70,111	91,111	119,111	—	—	10

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produtos					Tempo de retenção
Anfepramona	C13H19NO	Positivo	206	100,169	105,111	133,111	—	—	0
Clorfentermina	C10H14ClN	Positivo	184	99,071	125,071	139,054	—	—	7,3
Etilefrina	C10H15NO2	Positivo	182	91,111	109,111	121,111	—	—	0,85
Fencamina	—	Positivo	385	91,111	179,111	236,111	—	—	6,58
Fenfluramina	C12H16F3N	Positivo	232	109,111	119,04	139,04	—	—	8,13
Foledrina	—	Positivo	166	77,111	79,111	91,111	—	—	20,6
Furfenorex	C15H19NO	Positivo	230	81,111	91,111	148,111	—	—	6,8
Isomepteno M1 (2—metil—6—metil—amino—heptan—2—ol)	—	Positivo	160	69,169	111,183	142,222	—	—	1,2
Isometepteno	C9H19N	Positivo	142	58,151	69,347	111,29	—	—	5,6
Isometepteno N—desmetil	—	Positivo	128	41,000	69	111	—	—	0
Mefentermina	C11H17N	Positivo	164	91,111	105,111	133,111	—	—	4,6
Metoxifenamina	C11H17NO	Positivo	180	90,950	121,111	148,772	—	—	5,05
Norfenfrina	C8H11NO2	Positivo	154	91,111	119,04	136,111	—	—	0,65
Niquetamida	C10H14N2O	Positivo	179	53,111	72,111	78,111	—	—	10
Dextromoramida	C25H32N2O2	Positivo	393	306,000	236	167	—	—	12,2
Fentanil	C22H28N2O	Positivo	337	188,000	105	132	—	—	9,54
Mefentanila	—	Positivo	351	105,000	202	77	—	—	8,15
Meperidina	C15H21NO2	Positivo	248	220,000	174	103	—	—	6,54
Metadona	C21H27NO	Positivo	310	265,000	105	223	—	—	12,12

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produtos					Tempo de retenção
Mitraginina	—	Positivo	399	115,000	174	367	—	—	0
Norfentanil	C15H22N2O	Positivo	233	84,000	177	150	—	—	5,15
Normeperidina	—	Positivo	234	160,000	91	188	—	—	6,78
Oxicodona	C18H21NO4	Positivo	316	298,000	241	181	—	—	1,9
Pentazocina	C19H27NO	Positivo	286	218,000	173	159	—	—	8,33
PI Metil efedrina—D3	—	Positivo	183	165,000	—	—	—	—	0
Sulfentanil	C22H30N2O2S	Positivo	387	238,000	111	77	—	—	11,23

Fonte: Autoria própria (2025).

Tabela A2 – Substâncias da classe PFAS presentes no banco de dados de contaminantes emergentes

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produtos					Tempo de retenção
Perfluorooctanesulfonicacid (PFOS)	C8F17SO3H/ C8HF17O3S	—	498,7325	498,9287	218,9868	168,9893	79,9573	418,9737	15,69074
Perfluorooctanoic acid (PFOA)	C8HF15O2	—	412,966	168,9894	80,9653	218,9868	800	3,689,771	15,1429

Fonte: Autoria própria (2025).

Tabela A3 – Substâncias da classe EDCs presentes no banco de dados de contaminantes emergentes

Nome	Fórmula molecular	Modo de Ionização	Íon precursor	Íons produtos						Tempo de retenção
17— α ethynyl estradiol	C21H26O2	Positivo	311,20	121,06	91,05	77,04	78,05	65,04	—	14,544 min
17 α —estradiol	C18H24O2	Positivo	273,1849	273,1843	255,1733	256,178	274,1859	224,0635	—	12,002 min
Equilenin	C18H18O1	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Equilin	C18H20O1	—	—	148,1130	160,0843	95,0477	186,0998	132,0179	—	—
Estriol	C18H24O3	Positivo	289,798	289,1776	288,1715	—	—	—	—	6,750 min
Ethynyl estradiol (17— alpha ethynyl estradiol)	C20H24O2	Positivo	—	296,978	253,32	237,274	237,274	172,311	218,185	—
Norethindrone (19— Norethisterone)	C20H26O2	Positivo	299,2006	299,2008	300,2039	301,2063	281,1898	231,1733		9,359 min
Levonorgestrel ¹	C21H28O2	Negativo	311,2017	149,0972	133,0659	119,0502	—	—	—	19,923 min
Bisphenol A	C15H16O2	Negativo	227,108	227,10787	211,07726	133,06589	—	—	—	15,0379 min
4—n—nonylphenol	C15H24O	Negativo	219,1754	219,1758	—	—	—	—	—	6,203 min

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produtos						Tempo de retenção
Etinilestradiol	C ₂₀ H ₂₄ O ₂	Positivo	—	296,978	253,32	237,274	172,311	218,185	—	
Estrona	C ₁₈ H ₂₂ O ₂	Negativo	269,1547	145,0665	143,0504	159,0817	183,0814	253,1241	—	0,167 min
4—n—octilfenol	C ₁₄ H ₂₂ O	Negativo	205,1598	205,1605	—	—	—	—	—	5,817 min
17β—Estradiol	C ₁₈ H ₂₂ O ₂	Negativo	269,1547	145,0665	143,0504	159,0817	183,0814	253,1241	—	0,167 min
Clostebol	C ₂₀ H ₂₈ O ₁	Positivo	323,213	131,071	323,213	143	—	—	—	—
Metandienona	C ₂₁ H ₃₀ O ₃	Positivo	301,21	121	147	149,1	—	—	—	—
PI Metiltestosterona	C ₂₀ H ₃₀ O ₂	Positivo	303,1	109,1	—	—	—	—	—	16,4

Fonte: Autoria própria (2025).

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produto					Tempo de retenção
Dicrotophos	C ₈ H ₁₆ NO ₅ P	Positivo	238,0839	112,0757	193,0261	127,0154	72,0443	238,0839	11,817min
Dieldrin	C ₁₂ H ₈ Cl ₆ O	—	—	—	—	—	—	—	—
Dimethoate	C ₅ H ₁₂ NO ₃ PS ₂	—	230,0069	198,9657	230,0081	170,9703	200,9614	124,9822	5,113 min
Diuron	C ₉ H ₁₀ Cl ₂ N ₂ O	—	231,0092	231,01004	185,95235	149,97539	159,97299	121,98047	14,6707 min
Ethalfuralin	C ₁₃ H ₁₄ F ₃ N ₃ O ₄	—	—	—	—	—	—	—	—
Ethoprop	C ₈ H ₁₉ O ₂ PS ₂	—	243,0637	172,9856	130,9386	114,9614	215,0326	201,0169	11,5 min
Fipronil	C ₁₂ H ₄ Cl ₂ F ₆ N ₄ OS	—	434,9314	329,9595	434,9312	331,9559	436,9276	398,9541	10,475 min
Flufenacet	—	—	364,0737	194,0968	364,0736	152,0496	365,0766	153,0527	9,9 min
Fluometuron	C ₁₀ H ₁₁ F ₃ N ₂ O	—	233,0896	72,0481	160,0371	233,0881	188,0308	72,08	9,983 min
Iprodione	C ₁₃ H ₁₃ Cl ₂ N ₃ O ₃	—	330,0407	244,9879	330,0405	287,9936	98,984	174,992	12,3 min
Malathion	C ₁₀ H ₁₉ O ₆ PS ₂	—	329,0288	124,98332	94,93643	78,95918	203,03871	212,25923	—
Methomyl	C ₅ H ₁₀ N ₂ O ₂ S	—	—	—	—	—	—	—	—

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produto					Tempo de retenção
Norflurazon	—	—	304,0459	284,0396	160,0366	97,0396	—	—	16,641 min
Oxyfluorfen	C ₁₅ H ₁₁ ClF ₃ NO ₄	—	362,0401	362,0401	315,9983	334,0088	318,0138	316,047	15,5 min
Phorate	C ₇ H ₁₇ O ₂ PS ₃	—	261,0201	75,0263	199,001	170,9697	153,0133	142,9384	11,631 min
Phosmet	C ₁₁ H ₁₂ NO ₄ PS ₂	—	318,0018	160,0393	178,05	113,0596	—	—	9,5 min
Phostebupirim	C ₁₃ H ₂₃ N ₂ O ₃ PS	—	319,124	277,0769	319,1238	153,1019	249,0455	291,0933	—
Profenofos	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Propachlor	C ₁₁ H ₁₄ ClNO	—	212,0837	212,0833	170,0355	214,0802	172,033	213,0867	8,2 min
Propanil	C ₉ H ₉ Cl ₂ NO	—	218,0134	218,013	220,0099	161,9861	163,9829	219,0159	9,396 min
Propargite	C ₁₉ H ₂₆ O ₄ S	—	—	—	—	—	—	—	—
Propazine	C ₉ H ₁₆ N ₅ Cl	—	230,1167	146,023	104,0024	79,0096	68,0292	110,0463	11,571 min
Propoxur	C ₁₁ H ₁₅ NO ₃	—	210,1125	111,0444	168,0643	93,0344	153,0898	58,0332	9,472 min
Terbufos	C ₉ H ₂₁ O ₂ PS ₃	—	—	—	—	—	—	—	—

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produto					Tempo de retenção
Thiamethoxam	C ₈ H ₁₀ ClN ₅ O ₃ S	—	292,0266	211,0648	131,9669	181,0542	210,057	122,0713	3,729 min
Tri—allate	C ₁₀ H ₁₆ Cl ₃ NOS	—	3040091	304,0093	306,0062	305,0115	261,9618	263,9594	12,809 min
Tribufos	C ₁₂ H ₂₇ OPS ₃	—	—	—	—	—	—	—	—
3—Hydroxycarbofuran	C ₁₂ H ₁₅ NO ₄	Positivo	238,1074	181,0859	238,1075	220,0969	163,0753	207,0651	4,051 min
Acephate	C ₄ H ₁₀ NO ₃ PS	Positivo	184,0192	142,9929	144,9887	143,995	124,9821	136,0158	2,955 min
Acetochlor	C ₁₄ H ₂₀ ClNO ₂	Positivo	270,1255	224,0828	226,0801	270,125	148,1112	225,0856	10,1 min
Acetochlorethanesulfonic acid (ESA)	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Acetochlor oxanilic acid(OA)	C ₁₄ H ₁₉ NO ₄	Positivo	266,1387	220,0961	205,0226	174,0937	—	—	6,6 min
Acrolein	C ₃ H ₄ O	—	—	—	—	—	—	—	—
Alachlor ethanesulfonicacid (ESA)	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Alachlor oxanilic acid(OA)	C ₁₄ H ₁₉ NO ₄	Positivo	266,1387	234,1131	223,0361	188,1069	—	—	6,6 min

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produto					Tempo de retenção
Metolachlor	C15H22ClNO1	Positivo	284,1411	284,1415	252,1151	254,1122	286,1392	253,1181	10,2 min
Metolachlorethanesulfonic acid (ESA)	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Metolachlor oxanilic acid(OA)	C15H21NO4	Positivo	280,1543	248,1279	280,1541	249,131	281,1584	149,0233	7,3 min
Oxirane, methyl	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Oxydemeton—methyl	C6H15O4PS2	—	—	—	—	—	—	—	—
Oxyfluorfen	C15H11ClF3NO4	Positivo	362,0400	362,0401	315,9983	334,0088	318,0138	316,047	15,5 min
Permethrin	C21H20Cl2O3	Positivo	391,0862	149,0233	167,0338	71,0854	355,1093	183,0803	18,0 min
Profenofos	C11H15BrClO3PS	—	—	—	—	—	—	—	—
Tebuconazole	C16H22ClN3O	Positivo	308,1524	308,1525	310,1496	309,1554	—	—	10,897 min
Tebufenozide	C22H28N2O2	Negativo	351,2078	351,2081	—	—	—	—	13,575 min
Thiodicarb	C10H18N4O4S3	Positivo	355,0563	88,0216	107,9937	78,967	62,0058	72,9979	15,765 min

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produto					Tempo de retenção
Thiophanate—methyl	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₄ S ₁	Positivo	343,0529	343,0533	311,0264	151,0312	226,0637	268,0202	6,938 min
Triphenyltin hydroxide (TPTH)	C ₁₈ H ₁₇ OSn	—	—	—	—	—	—	—	—
Vinclozolin	C ₁₂ H ₉ Cl ₂ NO ₃	Positivo	286,0031	286,003	214,0184	217,9769	267,9925	239,9976	12,2 min
Ziram	C ₆ H ₁₂ N ₂ S ₄ Zn	—	—	—	—	—	—	—	—
2,4 D	C ₈ H ₆ Cl ₂ O ₂	Negativo	259,9314	160,95686	124,98044	73,02969	218,96201	143,03401	143,034 min
Alachlor	C ₁₄ H ₂₀ ClNO ₁	Positivo	270,1255	238,0986	240,0954	270,125	239,1022	162,1262	10,2 min
Aldicarb	C ₇ H ₁₄ N ₂ O ₂ S	Positivo	213,067	89,042114	116,053215	213,067612	70,065636	98,021385	—
Aldrin	C ₁₂ H ₈ Cl ₆	—	—	—	—	—	—	—	—
Atrazine	C ₈ H ₁₄ ClN ₄	Positivo	—	170,10423	128,05695	86,0359	86,0359	69,00861	14,3272 min
Carbendazim	C ₉ H ₉ N ₃ O ₁	—	—	—	—	—	—	—	—
Carbofuran	C ₁₂ H ₁₅ NO ₂	Positivo	222,1125	222,1124	165,0918	123,0443	—	—	9,746 min
Chlordane	C ₁₀ H ₆ Cl ₇	—	—	—	—	—	—	—	—

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produto					Tempo de retenção
Chlorpyrifos	C ₉ H ₁₁ Cl ₃ NO ₃ PS	Positivo	349,9335	96,9521	106,9454	78,9429	143,9398	64,9826	16,34 min
DDT	C ₁₄ H ₉ Cl ₄	—	—	—	—	—	—	—	—
Diuron	C ₉ H ₁₀ Cl ₂ N ₂ O	Positivo	14,7141	233,024	72,04436	159,97189	132,96091	214,11671	14,7141 min
Glyphosate	C ₃ H ₈ NO ₅ P	Positivo	170,021	88,039551	60,045464	124,015831	—	—	—
Lindane	C ₆ H ₆ Cl ₆	—	—	—	—	—	—	—	—
Methamidophos	C ₂ H ₈ NO ₂ PS	Positivo	142,0086	142,0085	94,0052	124,982	109,9825	—	1,413 min
Metolachlor	C ₁₅ H ₂₂ ClNO	Positivo	284,1411	284,1415	252,1151	254,1122	286,1392	253,1181	10,2 min
Molinate	C ₉ H ₁₇ NOS	Positivo	188,1103	126,0912	188,1102	83,0854	98,0963	55,0540	10,5 min
Profenofos	C ₁₁ H ₁₅ BrClO ₃ PS	—	—	—	—	—	—	—	—
Simazine	C ₇ H ₁₂ ClN ₅	Positivo	202,0854	145,0635	146,0664	144,0552	131,048	147,0705	7,439 min
Atrazina	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Mancozebe	C ₄₀ H ₆₀ Mn ₉ N ₂₀ S ₄₀ Zn	—	—	—	—	—	—	—	—

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produto					Tempo de retenção
Clorotalonil	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Acefato	C ₄ H ₁₀ NO ₃ PS	—	184,0192	142,9929	144,9887	143,995	124,9821	136,0158	2,955 min
Dibrometo de diquate	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Clorpirifós	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Metomil	C ₅ H ₁₀ N ₂ O ₂ S	Positivo	163,0536	122,027	88,0215	65,0055	107,0702	106,0321	3,6 min
Malationa	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Difenoconazol	C ₁₉ H ₁₇ Cl ₂ N ₃ O ₃	Positivo	406,072	186,0515	406,0722	206,0803	408,0692	407,0751	11,599 min
Estricnina	C ₂₁ H ₂₂ N ₂ O ₂	Positivo	335,243	156,111	184,04	220,04	—	—	4,38

Fonte: Autoria própria (2025).

Tabela A5 – Substâncias da classe de contaminantes orgânicos presentes no banco de dados de contaminantes emergentes

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produto					Tempo de retenção
1,2,3—Trichloropropane	C3H5Cl3	—	—	—	—	—	—	—	—
1,4—Dioxane	C4H8O2	—	—	—	—	—	—	—	—
2,4—Dinitrophenol	C6H4N2O5	—	183005	183,00467	154,94737	123,00861	153,00699	76,97005	8,780 min
2—Aminotoluene	C7H9N	Positivo	108,0808	108,0808	91,0543	93,0573	65,0387	119,0605	7,952 min
6—Chloro—1,3,5—triazine— 2,4—diamine	C3H4CLN5	Positivo	146,0228	146,0241	—	—	—	—	2,878 min
Acrolein	C3H4O	—	—	—	—	—	—	—	—
Anthraquinone	C14H8O2	Positivo	209,0597	209,0595	—	—	—	—	9,212 min
Bisphenol A	C15H16O2	Negativo	227,108	227,10787	221,07726	133,06589	—	—	15,0379 min
Methyl tert—butyl ether	C5H12O	—	—	—	—	—	—	—	—
Methylmercury	CH3Hg	—	—	—	—	—	—	—	—
Nonylphenol	C15H24O	Negativo	219,1754	219,1765	106,0414	—	—	—	6,203 min

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produto					Tempo de retenção
Quinoline	C ₉ H ₇ N	Positivo	130,0651	130,0638	131,0667	—	—	—	6,290 min
Tributyl phosphate	C ₁₂ H ₂₇ O ₄ P	Positivo	267,172	98,9842	155,0465	211,1085	267,1705	80,9735	0,148 min
Trimethylbenzene	C ₉ H ₁₂	—	—	—	—	—	—	—	—
1,1—Dichloroethane	C ₂ H ₄ Cl ₁	—	—	—	—	—	—	—	—
1,1,1,2—Tetrachloroethane	C ₂ H ₂ Cl ₃	—	—	—	—	—	—	—	—
4,4'—Methylenedianiline	C ₁₃ H ₁₄ N ₂	—	—	—	—	—	—	—	—
Acetamide	C ₂ H ₅ NO	—	—	—	—	—	—	—	—
Acetaldehyde	C ₂ H ₄ O	Positivo	—	30	45	48	46	29	—
Aniline	C ₆ H ₇ N	Positivo	94,0651	94,0651	53,0388	105,0447	77,0386	93,0573	0,461 min
Benzyl chloride	C ₇ H ₇ Cl	—	—	—	—	—	—	—	—
Butylated hydroxyanisole	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Chloromethane	CH ₃ Cl	—	—	—	—	—	—	—	—

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produto					Tempo de retenção
Cumene hydroperoxide	C ₉ H ₁₂ O ₂	—	—	—	—	—	—	—	—
Ethylene glycol	C ₂ H ₆ O ₂	—	—	—	—	—	—	—	—
Ethylene thiourea	C ₃ H ₆ N ₂ S	Positivo	103,0323	103,0324	60,0558	86,0059	86,0349	76,0216	0,488 min
Formaldehyde	CH ₂ O	—	—	—	—	—	—	—	—
Halon 1011(bromochloromethane)	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Hexane	C ₆ H ₁₄	—	—	—	—	—	—	—	—
Methanol	CH ₃ OH	—	—	—	—	—	—	—	—
Methyl tert—butyl ether (MTBE)	(CH ₃) ₃ COCH ₃	—	—	—	—	—	—	—	—
Nitrobenzene	C ₆ H ₅ NO ₂	—	—	—	—	—	—	—	—
Nitroglycerin	C ₃ H ₅ N ₃ O ₉	—	—	—	—	—	—	—	—
N—Methyl—2—pyrrolidone	C ₅ H ₉ NO	Positivo	100,0757	58,0281	100,0763	69,0329	58,0644	56,0487	3,101 min

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produto					Tempo de retenção
N— nitrosodiethylamine(NDEA)	—	—	—	—	—	—	—	—	—
N— nitrosodimethylamine(NDMA)	C2H6N2O	Positivo	75,0553	75,0553	58,0526	57,0447	—	—	1,3 min
N—nitroso—di—n— propylamine (NDPA)	C6H14N2O	Positivo	131,1179	89,0709	131,118	53,0022	53,9974	67,9893	6,4 min
N—Nitrosodiphenylamine	C12H10N2O	Positivo	199,0866	169,0886	199,0867	168,0809	66,0464	104,0494	10,1 min
N—nitrosopyrrolidine(NPYR)	C4H8N2O	Positivo	101,0709	101,0709	55,0542	59,024	53,0386	56,062	2,2 min
Nonylphenol	C15H24O	Negativo	219,1754	219,1758	—	—	—	—	6,203 min
n—Propylbenzene	C9H12	—	—	—	—	—	—	—	—
o—Toluidine	C7H9N	Positivo	108,0808	108,0808	91,0543	93,0573	65,0387	119,0605	7,952 min
Quinoline	C9H7N	Positivo	130,0651	130,0638	131,0667	—	—	—	6,290 min
RDX (Hexahydro—1,3,5— trinitro—1,3,5—triazine)	C3H6N6O6	—	—	—	—	—	—	—	—

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produto					Tempo de retenção
Sec—Butylbenzene	C10H14	—	—	—	—	—	—	—	—
Toluene diisocyanate	C9H6N2O2	—	—	—	—	—	—	—	—
Triethylamine	C6H15N	—	—	—	—	—	—	—	—
Urethane	C3H7NO2	—	—	—	—	—	—	—	—
Caffeine	C8H10N4O2	Positivo	—	195,08748	138,0665	110,07152	83,06789	69,04475	9
Ácido ritalínico	—	—	220,152	220,152	84,111	174,111	—	—	5,8
Anfetamina	C9H13N	—	136,152	136,152	91,111	119,111	—	—	10
Benzilpiperazina	C27H32N2O3	—	177,183	177,183	85,111	91,111	—	—	1,4
Brucina	C23H26N2O4	—	395,243	229,058	—	—	—	—	—
Coca (benzoilecgonina)	—	—	290,243	105,04	—	—	—	—	—
Cocaina	C17H21NO4	—	304,213	105,111	—	—	—	—	—
Dobutamina	C18H23NO3	—	302,274	107,111	—	—	—	—	—

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produto					Tempo de retenção
Fenmetrazina	C ₁₁ H ₁₅ NO	—	178,152	91,111	—	—	—	—	—
Fentermina	C ₁₀ H ₁₅ N	—	150,152	65,111	—	—	—	—	—
Metilecgonina (Ecgonina Metilester)	—	—	200,152	82,111	108,111	119,111	—	—	0,65
N—etil—4—metoxi— anfetamina	—	—	194,243	91,111	121,111	149,111	—	—	10
N—metil—N—(1—fenetil)— amina	—	—	136,152	51,169	77,111	79,111	—	—	1,76
Normetanefrina	—	—	166,152	79,111	106,111	121,111	—	—	0,65
PI Catina D3 frag	—	—	137,152	137,152	117,111		—	—	10
p—OH—Anfetamina	—	—	152,152	152,152	107,111	135,111	—	—	1
2—etilamino—1—fenilbutano	—	Positivo	178,213	91,111	105,111	—	—	—	5,55
2—fluorometanfetamina	—	Positivo	168,152	109,111	137,111	—	—	—	3
4—fluoroanfetamina	—	Positivo	154,152	109,111	137,111	—	—	—	2,5

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produto					Tempo de retenção
Benzfetamina	C17H21N	Positivo	240,213	91,058	119,111	—	—	—	8,5
Catinona	C9H11NO	Positivo	150,183	90,111	105,111	—	—	—	0
dimetilbutilamina		Positivo	102,152	43,222	57,151	—	—	—	2,12
Etilanfetamina	C11H17N	Positivo	164,152	65,111	77,111	—	—	—	4
Hexan—1—amino	C6H15N	Positivo	102,152	57,151	85,151	—	—	—	2,7
Hexan—2—amino	—	Positivo	102,152	57,151	85,151	—	—	—	2
MDA (metilenodioxianfetamina)	—	Positivo	180,152	105,111	133,111	—	—	—	2,8
MDEA	C12H17NO2	Positivo	208,152	135,111	163,111	—	—	—	4
Mefedrona	—	Positivo	178,152	119,111	144,111	—	—	—	4,2
Metanfetamina	C10H15N	Positivo	150,152	91,111	119,111	—	—	—	2,93
Pemolina	C9H8N2O2	Positivo	177,152	79,111	106,111	—	—	—	10
Pentetrazol	C6H10N4	Positivo	139,152	79,111	96,111	—	—	—	3,6

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produto					Tempo de retenção
PI Catina D3 frag	—	Positivo	137,152	—	—	—	—	—	10
p—metoxianfetamina	—	Positivo	166,152	121,111	149,111	—	—	—	10
2 C—B	C6Cl6	Positivo	260,061	149,111	164,111	212,96	—	—	7,13
2—amino—octano	—	Positivo	130,152	43,222	57,151	71,183	—	—	8,5
carfedon	—	Positivo	219,152	145,111	174,111	202,04	—	—	7,5
Fenetilina	C18H23N5O2	Positivo	342,274	91,111	119,111	207,04	—	—	7,13
Isometepteno OH	—	Positivo	158	58	67	109	—	—	0
Mefenorex	C12H18ClN	Positivo	212,152	77,04	91,111	119,111	—	—	6,6
Norfenfluramina	C8H11NO2	Positivo	204,152	109,111	159,054	187,054	—	—	7,2
PI 7—propilteofilina	—	Positivo	223,152	181,071	—	—	—	—	10
PI Buspirona	C21H31N5O2	Positivo	386,243	122,111	—	—	—	—	10
PI Catina D3 frag	—	Positivo	137,152	117,111	—	—	—	—	10

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produto					Tempo de retenção
p—Metilamfetamina	—	Positivo	150,152	77,111	103,111	105,111	—	—	5,6
Propilexedrina	—	Positivo	155,97	69,111	83,111	125,183	—	—	7,6
N—etilnicotinamida	—	Positivo	151,152	53,111	78,04	80,111	—	—	10
3,3 — difenilpropilamina	—	Positivo	212,183	91,111	117,111	152,111	—	—	0
Amifenazol	C ₉ H ₉ N ₃ S	Positivo	192,152	106,111	117,111	133,111	—	—	2,4
BDB	C ₁₁ H ₁₅ NO ₂	Positivo	194,183	77,111	105,111	135,111	—	—	4,75
Dimetilanfetamina	—	Positivo	164,183	65,111	91,111	119,183	—	—	2,9
Hept—1—amino	—	Positivo	116,152	29,333	39,222	41,222	—	—	6,16
Metedrona	—	Positivo	194,152	118,111	146,111	161,111	—	—	3,18
Ortetamina	C ₁₀ H ₁₅ N	Positivo	150,152	103,111	57,151	71,151	—	—	5,1
Prenilamina	C ₂₄ H ₂₇ N	Positivo	330,304	91,111	119,111	167,111	—	—	13,72
Dermorphin	—	Positivo	803,396	439,183			—	—	—

Nome	Fórmula molecular	Modo de ionização	Íon precursor	Íons produto					Tempo de retenção
PCP	C6Cl5OH	Positivo	244,243	86,111	91,111	159,183	—	—	—
Tetramisol	C11H12N2S	Positivo	205,152	91,111	117,111	123,04	—	—	—
6—MAM	C19H21NO4	Positivo	328	165	211	153	—	—	2,32
EDDP	C14H15O2PS2	Positivo	278	186	234	249	—	—	0
Heroína	—	Positivo	370	268	165	152	—	—	6,13

Fonte: Autoria própria (2025).