

O POTENCIAL DA ESPETROSCOPIA DE FLUORESCÊNCIA PARA CARACTERIZAÇÃO DE MATÉRIA ORGÂNICA DISSOLVIDA EM ÁGUAS

Joana SOARES^{1,2}, Elsa MESQUITA¹, Filipa FERREIRA², Maria João ROSA¹

1. Laboratório Nacional de Engenharia Civil, Departamento de Hidráulica e Ambiente, Núcleo de Engenharia Sanitária, Av. Brasil 101, Lisboa, Portugal, jjsoares@lnec.pt, emesquita@lnec.pt, mjrosa@lnec.pt

2. Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa, CERIS, Departamento de Engenharia Civil e Arquitetura e Georecursos, Av. Rovisco Pais, 1049-001, Lisboa, Portugal, joana.soares@tecnico.ulisboa.pt, filipamferreira@tecnico.ulisboa.pt

RESUMO

A espectroscopia de fluorescência é uma técnica analítica cuja relevância para a monitorização da qualidade da água e controlo de processos de tratamento tem vindo a ser reconhecida nos últimos anos, pelo seu potencial na deteção e caracterização de matéria orgânica dissolvida (DOM). Esta técnica permite detetar e quantificar compostos que emitem fluorescência (fluoróforos), através do registo da intensidade da radiação emitida a determinado comprimento de onda (c.d.o. emissão) em função do comprimento de onda da radiação incidente (c.d.o. excitação). Obtêm-se assim matrizes de excitação e emissão de fluorescência (FEEM), nas quais a intensidade da fluorescência é representada em função dos respetivos pares de dados c.d.o. excitação e c.d.o. emissão, característicos de determinado fluoróforo. Com o recurso a métodos estatísticos, como a análise de Fatores Paralelos (PARAFAC) ou a análise de componentes principais (PCA), é possível decompor os dados das matrizes FEEM de modo a identificar e quantificar os fluoróforos presentes na água. A principal vantagem da análise PARAFAC em relação a outros métodos estatísticos é que permite preservar a estrutura tridimensional dos dados, possibilitando a identificação de componentes químicos com significado fisicamente interpretável.

A utilização de FEEM-PARAFAC permite detetar e quantificar frações da DOM presentes na água (e.g., substâncias com carácter húmico, fúlvico, proteico, entre outros) correlacionáveis com (i) parâmetros indicadores de qualidade da água (e.g., carência química de oxigénio (CQO) ou carência bioquímica de oxigénio (CBO₅), no caso de águas residuais), (ii) micropoluentes orgânicos ou (iii) o potencial de formação de subprodutos de desinfecção (e.g., trihalometanos (THM), N-nitrosodimetilamina (N-NDMA)). A espectroscopia de fluorescência destaca-se de outras técnicas analíticas pela elevada sensibilidade, seletividade e natureza não destrutiva e por permitir caracterizar a DOM de forma expedita, requerendo pequenas quantidades de amostra. Além disso, pode ser usada *online*, permitindo a monitorização e deteção rápida de variações na qualidade da água, podendo assim integrar-se em sistemas de monitorização inteligente (*smart monitoring*) e em sistemas de alerta precoce (*early warning systems*).

Nesta comunicação, descreve-se uma metodologia para a análise de DOM de amostras de águas residuais por FEEM-PARAFAC, desde a colheita da amostra até ao processamento dos dados de FEEM, ilustrando com resultados de vários tipos de águas.

Palavras-Chave: espectroscopia de fluorescência; matrizes de excitação-emissão de fluorescência (FEEM); matéria orgânica dissolvida; qualidade da água; PARAFAC.