cbecimat26
26° Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais
22 a 26 de novembro de 2026
Costão do Santinho
Florianópolis-SC

DETECÇÃO ULTRASSENSÍVEL DE AGROQUÍMICOS EM ÁGUA POR SERS COM NANOPARTÍCULAS DE PRATA E APRENDIZADO DE MÁQUINA

Patricia Da Rosa Lira[1]; Paola Da Rosa Lira[2];Victor Duarte Trindade[3]; Any Caroline Casales[4], Jacson Weber Menezes[5], Chiara Valsecchi[6]

1. Universidade Federal do Pampa (UNIPAMPA), Programa de Pós-Graduação em Engenharia, Campus Alegrete, RS, Brasil

Introdução

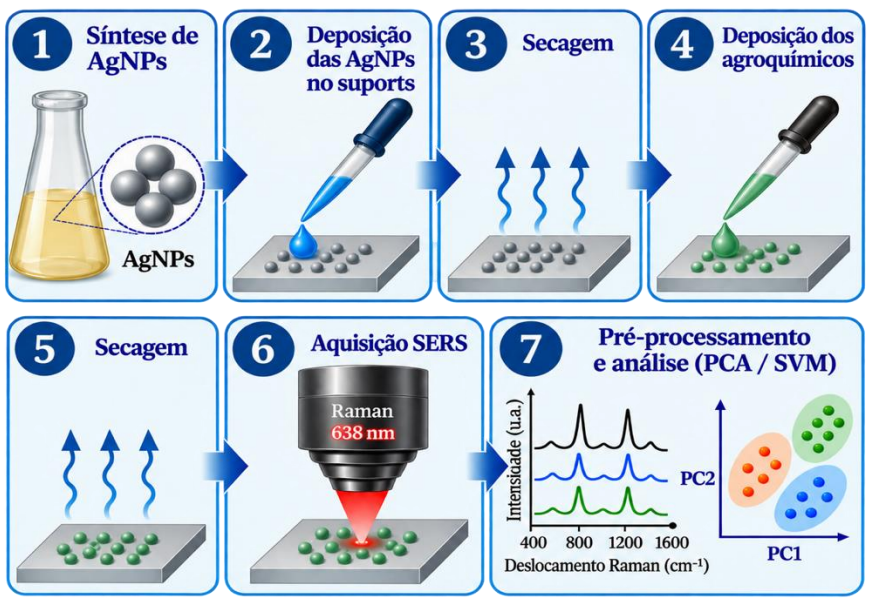
A presença de agroquímicos em recursos hídricos representa um desafio para o monitoramento ambiental, especialmente em níveis traço. Nesse contexto, a espectroscopia Raman intensificada por superfície (SERS) apresenta potencial para a detecção rápida e sensível de contaminantes, utilizando nanopartículas de prata (AgNPs) que promovem a formação de *hotspots* plasmônicos responsáveis pela intensificação do sinal Raman. A integração da SERS com o aprendizado de máquina permite a detecção e discriminação de glifosato, profoxydim e flumioxazina, inclusive em misturas binárias.

Objetivos

Desenvolver e validar uma abordagem baseada em SERS e aprendizado de máquina para identificar, discriminar e quantificar agroquímicos em água, isolados e em misturas binárias.

Metodologia

As etapas experimentais estão esquematizada na Figura 1:



- as concentrações das misturas de agrodefensivos foram entre 0,0005 e 2 ppm.
- para cada substrato SERS foram coletados 100 espectros;
- foram feitas 5 réplicas para cada substrato;
- SVM multiclasses para classificação das diferentes concentrações, com divisão dos dados por réplica (aproximadamente 70% para treinamento e 30% para validação).

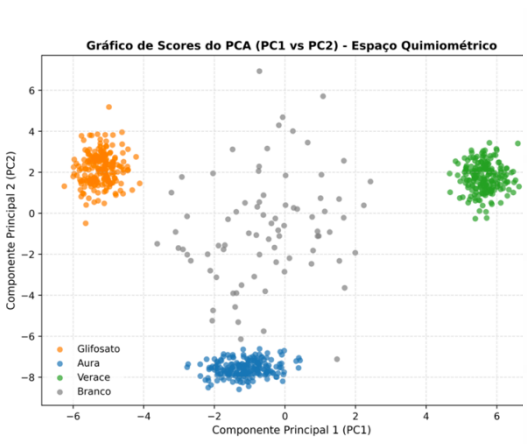
Resultados e Discussão

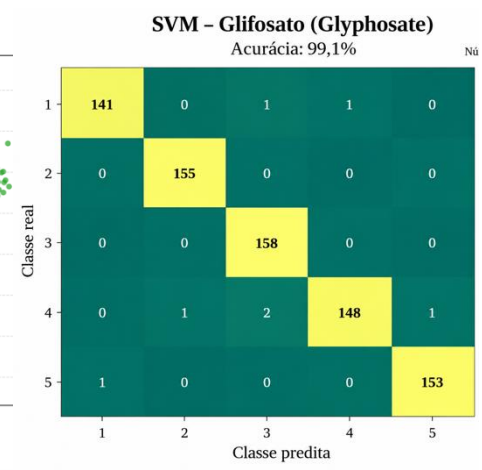
A PCA evidenciou separação dos grupos, com 64,7% da variância explicada pela PC1. Os modelos SVM apresentaram acurácia superior a 98,3% para os três agroquímicos, enquanto a regressão PLS apresentou desempenho dependente do analito, com R^2 entre 0,55 e 0,72.

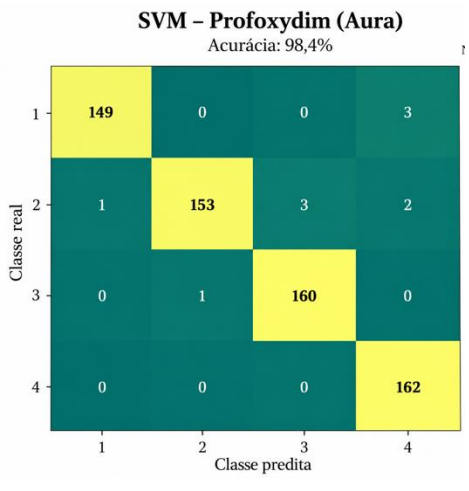
Desempenho da regressão PLS

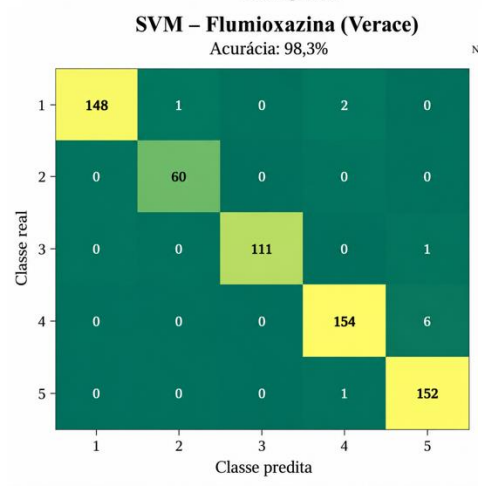
Agroquímico	R^2	RMSE (mg·L⁻¹)	LOD (mg·L⁻¹)
Glifosato	0,72	0,411	1,57
Profoxydim (Aura)	0,64	0,004	0,0147
Flumioxazina (Verace)	0,55	0,011	0,0471

R^2: coeficiente de determinação • RMSE: erro médio quadrático da raiz • LOD: limite de detecçãc









Conclusões

- A abordagem SERS apresentou capacidade de discriminação dos agroquímicos avaliados.
- PCA e SVM apresentaram elevada capacidade de discriminação e classificação.
- A regressão PLS demonstrou potencial para modelagem quantitativa de detecção.
- A integração SERS + aprendizado de máquina demostrou elevado potencial para o monitoramento e quantificação de agrodefensivos de uso comum em água.

Referências e Agradecimentos

LEE, P.C.; MEISEL, D. J. Phys. Chem., v.86, n.17, p.3391-3395, 1982.
GUO, S.; POPP, J.; BOCKLITZ, T. Nature Rev. Methods Primers, v.1, art.65, 2021.
DOS SANTOS, D.P. et al. Anal. Bioanal. Chem., v.415, p.3945-3966, 2023.

PPEng Programa de Pós-Graduação em Engenharia
unipampa Universidade Federal do Pampa
FAPERGS
CAPES