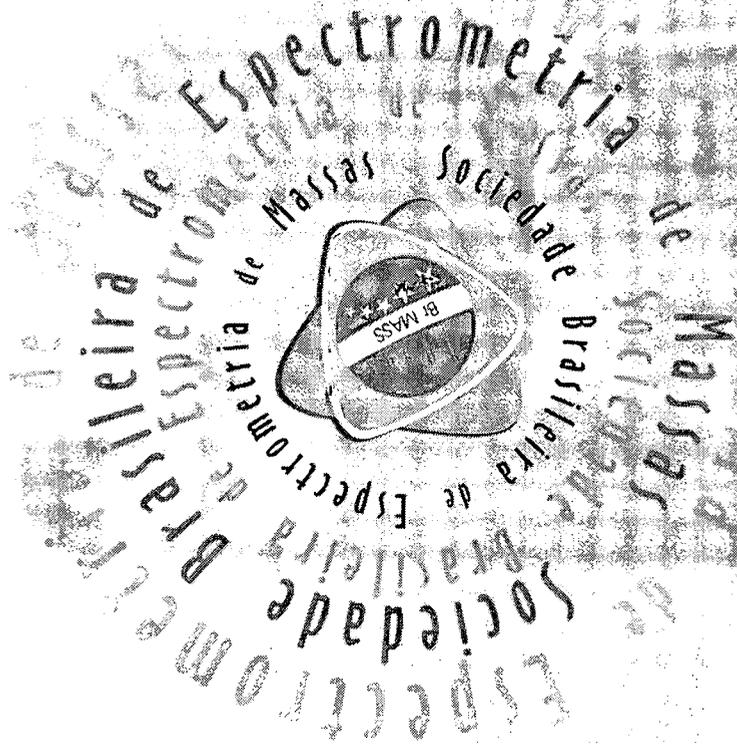


09, 10 e 11 Dezembro / 2007
The Royal Palm Plaza - Hotel Resort
Campinas / SP



LIVRO DE RESUMOS

2º Congresso
BRMASS

Novas Tecnologias – NT05

Advanced mass spectrometric applied to determined of composition in Lead (Pb-208) from residues of thorium facilities

José A. Seneda¹, Carlos A. da S. Queiroz¹, Soraya M. da R. Rizzo¹, Mauro S. Dias¹, Kei Sato², Mauricio H. Kakazu¹, Alcídio Abrão¹.

¹ *jaseneda@ipen.br*

¹ Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares Av. Lineu Prestes 2242 - Cidade Universitária - CEP: 05508-000 - São Paulo – SP BRASIL Telephone: (+55) (11) 3133-9000 Fax: (+55) (11) 3812-3546

² Universidade de São Paulo, Instituto de Geociências, Centro de Pesquisas Geo-Cronológicas. Rua do Lago 562. Butantã 05508-900 - Sao Paulo, SP – Brasil Telephone: (11) 38183972 Fax: (11) 38183993

Brazil has currently one of the largest reserves of thorium minerals, about 1200000 ton. As the growing demand for nuclear materials, in the units of purification of thorium was formed waste. These wastes are iron, silicon, sodium, rare earth, small amounts of residual thorium, radioactive material from the decay of thorium and lead radiogenic (Pb-208). This is dissolved in hydrochloric acid followed by a process of separation and recovery of lead by ion exchange resins. Lead obtained was analyzed spectrometry of mass (TIMS and ICPMS). In this work the analysis confirmed the increase in the isotope Pb-208 in about 68.5 abundance (atomic %) compared with natural lead, allowing its use in obtaining new elements and strategic material.

~~4623~~
126330

Ambiental - AM10

Desenvolvimento e validação de metodologia para determinação de resíduos de agrotóxicos em lodo de estação de tratamento de água para consumo humano

Luiz Fernando Soares Moracci, Hélio Akira Furusawa, Maria Aparecida Faustino Pires

Centro de Química e Meio Ambiente / CQMA - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares / IPEN

fernandomoracci@yahoo.com.br

O quadro evolutivo da agricultura brasileira não só traz benefícios financeiros à economia, como também, estimula inúmeros avanços tecnológicos no setor. Um dos pilares que deram e dão suporte à essa condição é o uso massivo de agrotóxicos, usados contra inúmeros organismos indesejáveis. Com base na legislação nacional em vigor e, na falta desta, na legislação de outros países e nos parâmetros toxicológicos, muitos estudos científicos estão sendo desenvolvidos com a finalidade de determinar e avaliar os impactos sofridos pelo meio ambiente, em função do uso dos agrotóxicos. No presente estudo utilizou-se a técnica da Cromatografia Líquida acoplada a um espectrômetro de massas triploquadrupolar com fonte de ionização por *electrospray* a pressão atmosférica, LC-ESI-MS/MS, API 5000 Applied Biosystems, considerada como uma das ferramentas analíticas mais poderosas da atualidade. A matriz avaliada foi o lodo oriundo de processos de tratamento de água para posterior consumo humano coletado na região do Vale do Ribeira. O desenvolvimento de técnicas instrumentais e métodos mais sensíveis demandam tratamento dos dados para que esses possam ser utilizados e transformados em informações confiáveis. Validar um método analítico é estimar o seu desempenho e eficiência em função do desenvolvimento de processos e da produção de resultados, cujos indicadores são a Seletividade/Especificidade, Linearidade, Intervalo de Trabalho, Sensibilidade, Exatidão, Precisão, Gráfico Analítico, Limite de Detecção, Limite de Quantificação e Robustez. Os processos envolvidos devem ser avaliados em seu conceito segundo a sua comparabilidade, rastreabilidade e confiabilidade usando o processo conhecido como Validação de Ensaio Químico. Esses indicadores produzem valores quantitativos e qualitativos que devem ser estatisticamente evidenciados e de forma objetiva. Estes são requisitos básicos para a confiabilidade metrológica.

~~12635~~ 12635 ✓

Produtos Naturais e Sintéticos – PS21

**ESTUDO COMPARATIVO DA COMPOSIÇÃO DOS ÁCIDOS GRAXOS
PROVENIENTES DE ÓLEOS AMAZÔNICOS: COPAÍBA, BURITÍ,
MARACUJÁ, AÇAÍ E CASTANHA DO PARÁ VIA GC/MS**

Felipe Valli², Paulo. G. Almeida¹, Ana C. H. R. Machado², Carlos E. Fernandes²,
Sergio Moura², Maria. A. Pires², Mayara Busnello, Oscar Vega^{2*}.

**ovega@ipen.br*

¹Instituto Mauá de Tecnologia. Pós-graduação-Engenharia de Processos Químicos e Bioquímicos. Brasil.

²Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares. Av. Prof. Lineu Prestes, 2242. Cidade Universitária. São Paulo, SP. Zip Code 05508-000.Brazil.

Muitas indústrias, principalmente farmacêuticas, estão focando desenvolvimentos de produtos com ativos naturais da Amazônia. O objetivo do presente trabalho é o estudo dos espectros de massas dos ácidos graxos nos óleos de Buriti, Copaíba, Maracujá, Açaí e Castanha do Pará analisados via Cromatografia a gás acoplada a Espectrometria de massas - GC/MS. Os ácidos graxos foram extraídos dos óleos amazônicos por meio do solvente Clorofórmio grau HPLC. Uma concentração de 100 µg.mL⁻¹ de óleos amazônicos em Clorofórmio foi utilizada para a caracterização química dos ácidos graxos. Uma alíquota desta concentração foi injetada no GC/MS. Os cromatogramas resultantes foram identificados por meio dos espectros de massas correspondentes para cada composto eluente, comparando com a livreria de espectros de massas NIST-92 que o espectrômetro possui. Ácidos graxos saturados e insaturados foram caracterizados, tais como: oléico, linoléico, pamicico, mirístico e láurico. Deve-se salientar que em cada análise química, uma assinatura dos óleos amazônicos foi determinada, como é o caso do óleo de Copaíba o compostos Copaene fica em destaque analítico como sendo a sua assinatura química.

12636V

MS Quali e Quanti - 12

**STUDY OF SUPRAMOLECULE COMPLEXATION BY ESI/MS/MS.
THE CASE OF P-TERT-BUTYLCALIX[6]ARENE COMPLEXATION
WITH AMMONIUM HYDROXIDE, AND AMMONIUM AND SODIUM
IONS.**

**Elen G. Santos¹, André Sassine¹, Helio A. Martins-Junior¹, Daniel T. Lebre²,
Maria C.F.C. Felinto¹, Felipe Valli¹, Maria A.F. Pires¹, Oscar Vega^{1*}.**

****ovega@ipen.br***

**¹Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares. Av. Prof. Lineu Prestes,
2242. Cidade Universitária. São Paulo, SP. Zip Code 05508-000. Brazil.**

**²Applied Biosystems do Brasil Ltda. Av. Do Café, 277, 1º andar, torre B. São
Paulo, SP. Zip Code 04311-000. Brazil.**

The formation of complexes involving p-tert-butylcalix[6]arene with neutral and charged species has been investigated by tandem mass spectrometry combined with electrospray ionization. Complexes of p-tert-butylcalix[6]arene with NH_4^+ ions were observed in the ratios 1:1, 2:1, and 3:1 together with the complexes of p-tertbutylcalix[6]arene with NH_4OH and Na^+ ions in the ratios 1:1:1, 2:1:1, and 3:1:1. A single 1:1 complex of p-tert-butylcalix[6]arene with Na^+ ions was observed. In addition, a doubly-charged complex of p-tert butylcalix[6]arene with NH_4OH , Na^+ , and NH_4^+ ions in the ratio 6:1:1:1 was observed. The identity of each complex was determined by mass analysis of fragment ions formed by the application of a declustering potential over the range 20 – 220 V and by observation of product ion mass spectra where in the collision energy was varied from 5 – 50 eV. Fragmentation of the complexes is characterised by the facile loss of the sodium ion as sodium hydroxide, loss of neutral p-tert-butylcalix[6]arene, and successive neutral losses of C_4H_8 from the six tert-butyl groups in each p-tert-butylcalix[6]arene molecule.

12 454 v