



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO TOCANTINS
CAMPUS UNIVERSITÁRIO DE GURUPI
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA**

RAABE FREITAS DOS SANTOS CARVALHO

**ESTUDO TEÓRICO DA INTERAÇÃO DE MICROPLÁSTICOS DE POLIETILENO
(PE) E DE POLICLORETO DE VINILA (PVC) COM OS PESTICIDAS 2,4-D,
TIAMETOXAM E CLOTIANIDINA**

**Gurupi, TO
2026**

Raabe Freitas dos Santos Carvalho

**ESTUDO TEÓRICO DA INTERAÇÃO DE MICROPLÁSTICOS POLIETILENO (PE)
E POLICLORETO DE VINILA (PVC) COM OS PESTICIDAS 2,4-D, TIAMETOXAM
E CLOTIANIDINA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação
em Química da Universidade Federal do Tocantins
(UFT), como requisito à obtenção do grau de Mestre (a)
em Química.

Orientador (a): Prof. Dr. Douglas Henrique Pereira

Gurupi, TO

2026

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Tocantins

C331e Carvalho, Raabe Freitas dos Santos.

ESTUDO TEÓRICO DA INTERAÇÃO DE MICROPLÁSTICOS DE POLIETILENO (PE) E DE POLICLORÉTO DE VINILA (PVC) COM OS PESTICIDAS 2,4-D, TIAMETOXAM E CLOTIANIDINA. / Raabe Freitas dos Santos Carvalho. – Gurupi, TO, 2026.

74 f.

Dissertação (Mestrado Acadêmico) - Universidade Federal do Tocantins – Câmpus Universitário de Gurupi - Curso de Pós-Graduação (Mestrado) em Química, 2026.

Orientador: Douglas Henrique Pereira

1. Microplásticos. 2. Pesticidas. 3. Adsorção. 4. Teoria do Funcional da Densidade (DFT). I. Título

CDD 540

TODOS OS DIREITOS RESERVADOS – A reprodução total ou parcial, de qualquer forma ou por qualquer meio deste documento é autorizado desde que citada a fonte. A violação dos direitos do autor (Lei nº 9.610/98) é crime estabelecido pelo artigo 184 do Código Penal.

Elaborado pelo sistema de geração automática de ficha catalográfica da UFT com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

RAABE FREITAS DOS SANTOS CARVALHO

**ESTUDO TEÓRICO DA INTERAÇÃO DE MICROPLÁSTICOS POLIETILENO (PE)
E POLICLORETO DE VINILA (PVC) COM OS PESTICIDAS 2,4-D, TIAMETOXAM
E CLOTIANIDINA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Química. Foi avaliada para obtenção do título de Mestre em Química e aprovada em sua forma final pelo orientador e pela Banca Examinadora.

Data de aprovação: 26 de janeiro de 2026.

Banca Examinadora

Prof. Dr. Douglas Henrique Pereira, ITA

Prof. Dra. Grasielle Soares Cavallini, UFT

Prof. Dr. Paulo Vitor Brandão Leal, UFVJM

AGRADECIMENTOS

Em 1º lugar agradeço ao meu Deus pela sua bondade comigo, sua misericórdia infinita e pela força para enfrentar as minhas dificuldades. Até aqui me ajudou o Senhor!

Agradeço ao João Ewerton, meu amor, por sempre estar comigo em cada etapa de minha vida, nos melhores e piores momentos nos últimos anos. Por me ajudar a permanecer firme para vencer as dificuldades que se apresentaram ao longo do caminho.

Aos meus pais Jonas e Cheila Maria, assim como minha irmã Rayssa, pelo incentivo, amor, compreensão e apoio durante minha jornada. Obrigada, por sonharem comigo.

Aos meus irmãos da Primeira Igreja de Governador Eugênio Barros, meu segundo lar, pelas orações, carinho e constante apoio.

Ao prof. Dr. Douglas Henrique Pereira meu orientador, por acreditar em mim, pelo apoio, paciência, competência e profissionalismo. Agradeço também por todas as oportunidades e ensinamentos além da vida acadêmica. Eu não poderia ter um orientador melhor.

Aos meus familiares, amigos que nem sempre estiveram comigo, mas foram pessoas que me influenciaram e sempre me apoiaram. Em especial a Muriely Bihain, amiga que a UFT me deu, agradeço pelo apoio e companheirismo.

A UFT pela excelência de ensino. Ao Laboratório de Matemática Aplicada e Química Computacional (LAMAQC) pela estrutura e ensinamentos. À CAPES (Código 001) e ao Programa de Pós-Graduação em Química (PPGQ). Agradeço também a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo -FAPESP (Grant #2023/17727-2), ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq, Grant # 304002/2024-0; #443317/2024); ao Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho em São Paulo (CENAPAD) e ao ITA pelos recursos computacionais.

Finalmente, agradeço ainda a todos que de modo direto ou indiretamente, contribuíram para a realização deste sonho: minha formação.

RESUMO

Os microplásticos (MPs), fragmentos plásticos menores que 5 mm, têm sido reconhecidos como potenciais transportadores de contaminantes no meio ambiente. Neste trabalho, simulações computacionais foram baseadas na Teoria do Funcional da Densidade (DFT) para avaliar a interação dos MPs polietileno (PE) e policloreto de vinila (PVC) com três pesticidas amplamente utilizados: ácido 2,4-D, Tiametoxam e Clotianidina. Os cálculos incluíram otimizações geométricas, energias de interação e análises do Mapa de Potencial Eletrostático (MEP), Orbitais Moleculares de Fronteira (FMOs) e Análises de Interações Não Covalentes (NCI). O MEP, apresentou sítios concentrados em grupos funcionais como nitro e carboxila, enquanto os FMOs revelaram reatividade química moderada para os pesticidas (E_{gap} 4,1-5,4 eV) e alta estabilidade para os polímeros (E_{gap} 7,5 - 8,1 eV). As otimizações estruturais apresentaram 19 complexos estáveis, com distâncias de interação que variaram entre 2,432 a 2,995 Å, e o PVC apresentou interações mais fortes com os contaminantes. As energias de ligação ($\Delta E_{\text{bind}} < 0$) confirmaram adsorção favorável, e os valores de entalpia $\Delta H < 0$ indicaram processos exotérmicos; no entanto, as energias de Gibbs ($\Delta G > 0$) demonstraram que a adsorção entre os polímeros puros e os pesticidas não foi espontânea em condições padrão. A análise das interações não covalentes (NCI) mostrou que o PVC realiza ligações de hidrogênio e interage também por forças eletrostáticas, enquanto o PE apresentou predominantemente interações fracas de van der Waals. De acordo com estes resultados, o PVC apresentou maior potencial para adsorver os pesticidas, conseqüentemente, demonstra maior propensão de transportá-los no ambiente. Assim, estes resultados colaboraram para demonstrar a relevância dos MPs na dinâmica do transporte de poluentes, evidenciando a contribuição da química computacional como ferramenta preditiva para a avaliação de risco ambiental.

Palavras-chaves: Microplásticos; pesticidas; adsorção; DFT; química computacional.

ABSTRACT

Microplastics (PMs), plastic fragments smaller than 5 mm, have been recognized as potential carriers of contaminants in the environment. In this work, computer simulations were based on the Density Functional Theory (DFT) to evaluate the interaction of polyethylene (PE) and polyvinyl chloride (PVC) PMs with three widely used pesticides: 2,4-D acid, Thiamethoxam and Clothianidin. The calculations included geometric optimizations, interaction energies, and Electrostatic Potential Map (MEP), Boundary Molecular Orbitals (FMOs), and Non-Covalent Interaction Analyses (NCI) analyses. The MEP showed sites concentrated in functional groups such as nitro and carboxyl, while the FMOs showed moderate chemical reactivity for pesticides (Egap 4.1-5.4 eV) and high stability for polymers (Egap 7.5 - 8.1 eV). The structural optimizations presented 19 stable complexes, with interaction distances ranging from 2.432 to 2.995 Å, and the PVC presented stronger interactions with contaminants. The binding energies ($\Delta E_{\text{bind}} < 0$) confirmed favorable adsorption, and the enthalpy values $\Delta H < 0$ indicated exothermic processes; however, Gibbs energies ($\Delta G > 0$) demonstrated that the adsorption between the pure polymers and the pesticides was not spontaneous under standard conditions. The analysis of non-covalent interactions (NCI) showed that PVC bonds hydrogen and also interacts by electrostatic forces, while PE showed predominantly weak van der Waals interactions. According to these results, PVC showed greater potential to adsorb pesticides, consequently, it demonstrates a greater propensity to transport them in the environment. Thus, these results collaborated to demonstrate the relevance of PM in the dynamics of pollutant transport, evidencing the contribution of computational chemistry as a predictive tool for environmental risk assessment.

Keywords: Microplastics; pesticides; adsorption; DFT; computational chemistry.

LISTA DE ILUSTRAÇÃO

Figura 1- Estrutura molecular do 2,4-D; Clotianidina e Tiametoxam.....	33
Figura 2 (a - e) - Mapa de Potencial Eletroestático do 2,4-D (a); Clotianidina (b); Tiametoxam (c); Policloreto de vinila (d) e Polietileno (e)	35
Figura 3 (a - e) - Gráficos de isodensidade dos orbitais moleculares FMOs.....	39
Figura 4 (a - c) - Representações estruturais do adsorvente PE com os pesticidas ,4-D, CLO e TMX,	43
Figura 5 (a - c) - Representações estruturais do adsorvente PVC com os pesticidas 2,4-D, CLO e TMX	52
Figura 6 - Gráficos de isosuperfícies NCIs 3D (esquerda) e gráficos 2D (direita) RDG versus $(\lambda_2)\rho$	62

LISTA DE TABELAS

Tabela 1- Classificação dos MPs de acordo com a <i>Society of Plastic Industries</i>	21
Tabela 2- Presença de MPs no corpo humano.....	25
Tabela 3 - Análise estrutural das interações para os complexos formados entre o PE e contaminantes.....	50
Tabela 4 - Análise estrutural das interações para os complexos formados entre o PVC e contaminantes.....	58
Tabela 5 - Energia de interação (ΔE_{Bind}), energia de Gibb (ΔG) e Entalpia (ΔH) para os complexos estudados.....	60

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

2,4-D	Ácido 2,4-Diclorofenoxiacético
CAPES	Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior
CLO	Clotianidina
CNPq	Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico
DFT	Teoria Funcional da Densidade (<i>Density Functional Theory</i>)
FAPESP	Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo
HAPs	Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos
HOMO	Orbital Molecular Ocupado Mais Alto (<i>Highest Occupied Molecular Orbital</i>)
ITA	Instituto Tecnológico de Aeronáutica
LUMO	Orbital Molecular Não Ocupado Mais Baixo (<i>Lowest Unoccupied Molecular Orbital</i>)
MEP	Mapa de Potencial Eletroestático (<i>Molecular Electrostatic Potential</i>)
MPs	Microplásticos
NBO	Teoria do Orbital Natural (<i>Natural Bond Orbital</i>)
NCIs	Interações Não Covalentes (<i>Non-Covalent Interactions</i>)
OS	Poliestireno
PA	Poliamida
PCBs	Bifenilos Policlorados
PE	Polietileno
PEAD	Polietileno de Alta Densidade
PEBD	Polietileno de Baixa Densidade
PET	Tereftalato de Polietileno
PFA	Substâncias Perfluoroalquílicas
PLA	Ácido Polilático
POP	Poluentes Orgânicos Persistentes (<i>Persistent Organic Pollutants</i>)
PP	Polipropileno
PPGQ	Programa de Pós-Graduação em Química
PVC	Policloreto de Vinila

QTAIM Teoria de Átomos em Moléculas (*Quantum Theory of Atoms in Molecules*)

RDG Gradiente de Densidade Reduzido (*Reduced Density Gradient*)

TMX Tiametoxam

UFT Universidade Federal do Tocantins

LISTA DE SÍMBOLOS

$\text{\AA}$	Angstrom
ΔG	Variação de energia livre de Gibbs
ΔH	Variação de entalpia
D_{ow}	Coeficiente de partição octanol-água
E_{bind}	Energia de interação
E_{gap}	Energy gap
eV	Elétron-volt
k	Constante cinética de reação
K_{oc}	Coeficiente de partição carbono orgânico
LC_{50}	Concentração letal para 50% da população
μ	Coeficiente de viscosidade dinâmica ou momento dipolar
pH	Potencial hidrogeniônico
ρ	Densidade eletrônica
$\nabla\rho$	Gradiente da densidade eletrônica
λ_2	Segundo autovalor da matriz Hessiana

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	OBJETIVO	17
2.1	Objetivo geral.....	17
2.2	Objetivos específicos	17
3	METODOLOGIA.....	18
4	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	20
	4.1 Contaminante Ambiental: O plástico.....	20
	4.2 Microplásticos.....	21
	4.3 MPs e os possíveis danos à saúde humana.....	23
	4.4 MPs e os possíveis danos ao meio ambiente.....	25
	4.5 MPs oriundos do Polietileno e Policloreto de Vinila.....	28
	4.6 Interação entre MPs e Pesticidas.....	29
	4.7 Pesticidas 2,4-D, Tiametoxam e Clotianidina.....	30
	4.8 Química Computacional.....	33
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	35
	5.1 Mapa de Potencial Eletroestático (MEPs).....	35
	5.2 Orbitais Moleculares de Fronteira (FMOs).....	38
	5.3 Propriedades Estruturais.....	43
	5.4 Energia de Interação, Gibbs e Entalpia.....	58
	5.5 Interações Não Covalentes.....	60
6	CONCLUSÃO.....	66
	REFERÊNCIAS.....	67

1 INTRODUÇÃO

Em 2004, um novo conceito de poluentes surgiu, os quais foram denominados de Microplásticos (MPs) e tornaram-se poluentes presentes no solo, na água e na atmosfera (Chang, 2022; Zhao et al., 2022). Os MPs são definidos como fragmentos plásticos com o tamanho inferior a 5 mm oriundos do intemperismo físico, químico e biológico de plásticos não degradáveis e degradáveis. Devido ao seu pequeno tamanho, a área superficial específica dos MPs aumenta com a diminuição da partícula, variando de 10^{-2} para partículas com cerca de 200 μm até valores superiores a $1 \text{ m}^2/\text{g}$ para nanoplásticos, dependendo do polímero e do envelhecimento ambiental (Wu et al., 2025; Xu et al., 2024). Os MPs podem ser transportadores de metais tóxicos e poluentes orgânicos, intensificando a bioacumulação de toxinas que podem ser ingeridas por organismos de ecossistemas aquáticos e terrestres e, eventualmente, humanos, à medida que sobem na cadeia alimentar (Islam; Cheng, 2024). Estima-se que apenas 50% do volume produzido de plásticos por ano, aproximadamente 300 milhões de toneladas, tenha sido destinado a aterros sanitários, forma ambientalmente adequada da disposição final de resíduos, enquanto o restante, é descartado de maneira inadequada no ambiente, com estimativa de aumento significativo até 2030. Aproximadamente 8 milhões de toneladas de lixo plástico se infiltram nos lençóis freáticos e no ambiente marinho, anualmente (Das; Basak; Ganguly, 2024; Mo et al., 2021; Rodrigues et al., 2024).

O ecossistema terrestre, embora não se tenha abundância de informações disponíveis, é o mais afetado com a presença dos MPs por um tempo prolongado (> 100 anos), devido as atividades antropogênicas, como, produção agrícola com o uso de fertilizantes, filmes plásticos e a produção de bens de consumo a base de polímeros (Islam; Cheng, 2024; Surendran et al., 2023). O estudo de Yan et al. (2024) demonstrou que os MPs diminuem a produtividade das plantas, a fertilidade do solo e a biodiversidade microbiana. Nas plantas os MPs também podem modificar substancialmente as raízes, tecidos e biomassa (Rafa et al., 2024). Cerca de 80% dos MPs no ambiente aquático são oriundos do ecossistema terrestre, eles perturbam o equilíbrio ecológico e interferem na absorção de nutrientes e outros processos biológicos. Estima-se que 4,85 trilhões de partículas de MPs estão nos oceanos, afetando a fauna oceânica. Os MPs

também podem afetar a fertilidade e a mortalidade dos copépodes¹ e animais de água doce como: zooplâncton, zoobentos², moluscos e peixes, que podem sofrer os mesmos impactos após a ingestão. O consumo de peixes contaminados com MPs oferece riscos à saúde humana devido a exposição a substância como aditivos plásticos, metais tóxicos e poluentes orgânicos (Feisal et al., 2025; Islam; Cheng, 2024; Muhib et al., 2023; Rafa et al., 2024)

Diferentes tipos de MPs foram encontrados nos ecossistemas aquáticos e terrestres, como poliestireno (PS), polietileno (PE), polipropileno (PP), tereftalato de polietileno (PET), cloreto de polivinila (PVC), poliamida (PA) e ácido polilático degradável (PLA) (Chang, 2022; Gautam et al., 2024; Mo et al., 2021). O policloreto de vinila (PVC) e polietileno (PE) são os plásticos abundantes no uso diário, presentes em quase 50% dos produtos plásticos em todo o mundo. O PVC recebe uma atenção especial devido seu monômero ser carcinogênico, necessidade de aplicação de aditivos químicos em sua formulação, e facilidade de fragmentação em MPs em comparação com outros termoplásticos (Campisi; La Motta; Napierska, 2025). O PE é o tipo de plástico mais predominante em MPs nos ecossistemas aquáticos, é também, amplamente utilizado em sistemas de produção agrícola. O PE pode adsorver contaminantes hidrofóbicos e metais tóxicos e possui alta persistência ambiental (Castro et al., 2022; Verma et al., 2024; Zheng et al., 2025).

Como consequência da coexistência dos MPs com outros poluentes, os MPs, tendem a absorver e acumular produtos químicos nocivos, como pesticidas, causando efeitos tóxicos, representando riscos tanto para o meio ambiente quanto ao bem-estar humano. Apesar dos riscos ecológicos desses contaminantes emergentes ainda não serem totalmente elucidados, os MPs foram encontrados associados a diversos tipos de Poluentes Orgânicos Persistentes (POPs) como: antibióticos, metais tóxicos, hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (HAPs), bifenilos policlorados (PCBs), pesticidas organoclorados e substâncias perfluoroalquílicas (PFAs), por conta de sua hidrofobicidade e à sua grande área de superficial. Sendo os pesticidas, frequentemente encontrados associados aos MPs (Boughattas et al., 2024; Fu et al., 2021; Rafa et al., 2024; Siregar et al., 2024).

Após a adsorção entre os MPs e os contaminantes orgânicos, sua biodisponibilidade, comportamento ambiental, tempo de degradação, toxidades e propriedades físico-químicas são

¹ Copépodes são pequenos crustáceos do zooplâncton, amplamente distribuídos em ambientes aquáticos, que desempenham papel central na cadeia alimentar ao conectar o fitoplâncton a níveis tróficos superiores.

² Zoobentos: animais que vivem no fundo de ambientes aquáticos.

alterados. Desta forma esses poluentes podem coexistir em diferentes matrizes ambientais com outros poluentes orgânicos, alterando a forma de distribuição e dispersão (Mo et al., 2021b; Rodrigues et al., 2024; Shi et al., 2024).

Neste contexto, umas das formas de analisar a interação entre MPs e pesticidas, visando entender o seu mecanismo de adsorção, é através do método da Teoria Funcional da Densidade - DFT (*Density Functional Theory*). A aplicação da DFT ao estudo de MPs e pesticidas permite uma análise detalhada das interações de adsorção desses poluentes, através de cálculos precisos e da geometria molecular. Esses métodos computacionais são altamente utilizados na previsão de diversas propriedades moleculares, funcionando assim como uma ferramenta promissora para avaliar de forma molecular como os poluentes interagem com os MPs (Ahmed; Ermiş; Ermiş, 2024). Dessa forma, para este estudo, serão simuladas as interações entre os MPs de polietileno (PE) e policloreto de vinila (PVC) com os pesticidas 2,4-D, Tiametoxam e Clotianidina.

2 OBJETIVO

2.1 Objetivo geral

Utilizar cálculos teóricos de mecânica quântica para estudar o mecanismo, interação, ligação e energias de adsorção dos pesticidas 2,4-D, Tiametoxam e Clotianidina com os MPs polietileno e policloreto de vinila.

2.2 Objetivos Específicos

- I. Estudar o mecanismo de adsorção dos pesticidas 2,4-D, Tiametoxam (TMX) e Clotianidina (CLO) com matrizes de MPs de polietileno (PE) e policloreto de vinila (PVC);
- II. Entender os principais efeitos estereoeletrônicos responsáveis pela interação;
- III. Analisar os orbitais moleculares de fronteiras e os mapas de potencial eletrostáticos dos adsorventes e adsorvatos;
- IV. Usar a teoria de Interações Não Covalentes para entender as interações moleculares entre os pesticidas 2,4-D, TMX e CLO e os MPs de PE e PVC.

3 METODOLOGIA

As estruturas dos MPs (PVC e PE) e dos pesticidas (2,4-D, TMX e CLO) foram construídas no software GaussView (Dennington; Keith; Millam, 2019). No programa Gaussian 16 foram realizados cálculos de otimização e frequência vibracional das estruturas químicas e de todas as possíveis interações. Para as simulações computacionais foi empregada a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) (Morgon; Coutinho, 2007), utilizando o método B3LYP (Chai; Head-Gordon, 2008) com funções de base 6-31+G(d,p) e correção empírica de dispersão D3 (Petersson et al., 1988; Stevens et al., 1992). O modelo do solvente empírico SMD foi aplicado para simular meio aquoso, em específico a água. Os cálculos de frequência vibracionais foram conduzidos tanto para as moléculas isoladas quanto para os complexos, demonstrando valores positivos e confirmando que as estruturas otimizadas correspondem a mínimos locais de energia.

As propriedades energéticas e termodinâmicas das interações foram avaliadas a partir das energias de ligação (ΔE_{bind}), da entalpia (ΔH) e da energia de Gibbs (ΔG), segundo as equações 1- 3.

$$\Delta E_{\text{bind}} = E_{\text{complexo}} - (E_{\text{polímero}} + E_{\text{pesticida}}) \quad (1)$$

$$\Delta G = G_{\text{complexo}} - (G_{\text{polímero}} + G_{\text{pesticida}}) \quad (2)$$

$$\Delta H = H_{\text{complexo}} - (H_{\text{polímero}} + H_{\text{pesticida}}) \quad (3)$$

A caracterização das interações não covalentes (NCI) foi realizada pela análise da função de isosuperfície do gradiente de densidade reduzido (RDG), definida pela Equação 4.

$$RDG(r) = \frac{1}{2(3\pi^2)^{\frac{1}{3}}} \cdot \frac{|\nabla\rho(r)|}{\rho(r)^{\frac{4}{3}}} \quad (4)$$

Em que:

- $\rho(\mathbf{r})$: densidade eletrônica em um ponto “ $\mathbf{r}$ ” no espaço.
- $\nabla\rho(\mathbf{r})$: gradiente da densidade eletrônica.

Para análise gráfica do RDG, utiliza-se ainda o termo $\text{sign}(\lambda_2)\rho$, em que λ_2 corresponde ao segundo autovalor (λ_2) da matriz Hessiana de $\rho(\mathbf{r})$.

As análises de NCI foram realizadas no software Multiwfn (Lu; Chen, 2012) e a visualização das estruturas e mapas foram feitas no programa *Visual Molecular Dynamics* (VMD) (Humphrey; Dalke; Schulten, 1996).

4 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

4.1 Contaminante ambiental: o plástico

Plásticos são polímeros sintéticos de alta massa molecular, constituídos principalmente por cadeias de carbono e produzidos a partir de monômeros petroquímicos via polimerização, são materiais versáteis, de baixo custo e lenta degradação, que revolucionaram diversos setores desde o século XX (Hohn et al., 2020). Sua durabilidade, flexibilidade e leveza o tornaram ideal para uma ampla gama de aplicações, desde embalagens até peças automotivas. No entanto, essa mesma durabilidade que o torna tão útil, também é a fonte de um problema ambiental crescente que é a poluição plástica (Costa et al., 2024; Santana et al., 2025).

A produção de plástico disparou desde o ano 2000, passando de 1,5 milhão de toneladas em 1950 para 322 milhões de toneladas em 2015, 400,3 milhões de toneladas em 2022 com projeções de alcançar 670 milhões de toneladas em 2040. Essa alta produção, combinada com o descarte inadequado, levou à acumulação de resíduos plásticos em todo o planeta, com estimativas de que 12,7 milhões de toneladas fluem para os oceanos a cada ano (Costa et al., 2024; Surendran et al., 2023; Yang et al., 2024). Anualmente o Brasil, produz 7 milhões de toneladas de plásticos, com cerca de 54,5% dos plásticos produzidos destinados a setores com produtos de vida útil inferior a um ano, gerando uma grande quantidade de resíduos plásticos no país (ABIPLAST, 2024). Esse alto consumo fez do Brasil o maior produtor de plásticos da América Latina, e o quarto maior gerador de resíduos plásticos do mundo, com cerca de 11,3 milhões de toneladas por ano, atrás apenas dos Estados Unidos, China e Índia (Matusinho et al., 2024; Rafa et al., 2024).

O destino final desse resíduo plástico nem sempre é a reciclagem. No mundo, estima-se que apenas 9% dos resíduos plásticos sejam reciclados, enquanto o restante é destinado à incineração, aterros sanitários ou descartado no meio ambiente (Landera et al., 2023). Aproximadamente 80% dos detritos plásticos nos ambientes terrestres provêm do descarte inadequado através do transporte pelo ar e pela água da chuva até rios e lagos (Lebreton; Andrady, 2019). O rio Amazonas, por exemplo, é um dos vinte rios mais poluídos do mundo, contribuindo com cerca de 182.085 toneladas métricas de resíduos plásticos para o oceano anualmente (Silva et al., 2024). Esses resíduos, muitas vezes, são transportados pelas correntes marítimas, podendo se acumular em certos pontos dos oceanos, formando as chamadas ilhas de plástico (Kisnarti et al., 2024). Uma vez no meio ambiente, esses materiais são de difícil

remoção. Apesar de dispositivos serem desenvolvidos para a remoção de plásticos dos oceanos, estimativas demonstram que, mesmo utilizando diversos dispositivos, apenas 5% do plástico terá sido recuperado até 2150 (Hohn et al., 2020). Além disso, devido às condições ambientais, e descartes inadequados, muitos desses materiais plásticos se deterioram e fragmentam em partículas menores ao longo do tempo sob a influência de vários processos biológicos, químicos e fotoquímicos (Assis et al., 2023; Chang, 2022). A persistência da presença de resíduos plásticos no meio ambiente, resulta na formação dos MPs, representando uma grande parcela da poluição gerada por plásticos. A SPI classifica os plásticos em sete tipos com base na composição química do polímero, como representado na Tabela 1 e suas respectivas finalidades.

Tabela 1. Classificação dos MPs de acordo com a *Society of Plastic Industries*.

Tipo de plástico	Fórmula molecular	Usos comuns
Tereftalato de polietileno (PET)	$(C_{10}H_8O_4)_n$	Garrafas de água, fibras, recipientes para alimentos.
Polietileno de alta densidade (PEAD)	$(C_2H_4)_n$	Baldes e recipientes para armazenamento de produtos químicos.
Cloreto de polivinila (PVC)	$(C_2H_3Cl)_n$	Isolador de cabos e encanamento, mangueiras de jardim.
Poliestireno (PS)	$(C_8H_8)_n$	Recipientes rígidos e caixas de espuma, talheres descartáveis.
Polipropileno (PP)	$(C_3H_6)_n$	Tampinhas de garrafas e cordas, móveis e cadeiras
Polietileno de baixa densidade (PEBD)	$(C_2H_4)_n$	Sacos, filme plástico retrátil, materiais de embalagem de alimentos.
Outros – policarbonato, poliamidas, etc.	-	Aplicações automotivas, lentes em semáforo, mamadeiras, proteção ocular.

Fonte: Autor, 2026.

4.2 Microplásticos

Os MPs se originam do plástico que se fragmenta em pedaços cada vez menores, formando MPs (<5 mm) e nanoplásticos (<1 µm) caracterizados em sua maioria por sua

insolubilidade no ambiente aquático (Botterrell et al., 2022). Essa categoria abrangente de poluentes plásticos de pequeno porte é subdividida com base em seu tamanho: MPs grandes (1 mm a 5 mm), MPs pequenos (1 mm a 1 μ m) e nanoplásticos (tamanho <1 μ m) (Crawford; Quinn, 2017). Além do tamanho variável, os MPs também apresentam diversas formas, cores, composição química e carga elétrica, devido a extensão do polímero e aditivos usados e são classificados em dez tipos segundo *Society of Plastic Industries* (SPI) incluindo *pellets* (1-5 mm), microesferas (1 μ m - 1mm), fragmentos (1-5 mm), microfragmentos (1 μ m-mm), fibras (1 - 5 mm), microfibras (1 μ m-1 mm), filmes (1 – 5 mm), microfilmes (1 μ m – 1mm), espumas (1 – 5 mm) e microespumas (1 μ m – 1mm) (Surendran et al., 2023; Vasudeva et al., 2025).

Os MPs de diferentes polímeros têm propriedades químicas variadas e a maioria dos MPs são hidrofóbicos, justificando a adsorção com poluentes orgânicos. Por outro lado, MPs, hidrofílicos podem adsorver poluentes inorgânicos e iônicos por meio de interações eletroestáticas (Adamu et al., 2024).

A origem dos MPs pode ser classificada em dois tipos principais de acordo com sua fonte: primária e secundária. MPs primários são intencionalmente fabricados em pequenas dimensões para utilização em bens de consumo, usados em aplicações em indústrias, cosméticos, produtos de higiene pessoal, entre outras. Os MPs secundários são gerados pela fragmentação e degradação de resíduos plásticos no ambiente, impulsionados por fatores abióticos, como: como ação das ondas, degradação atmosférica, degradação hidrolítica, degradação térmica, degradação foto-oxidativa e degradação mecânica; e fatores bióticos decorrentes da ação de bactérias, fungos e algas, nestes processos a formação de biofilmes aumentam acentuadamente a disseminação de MPs, além de modificar a superfície dos MPs que se tornam ásperos e lascados, aumentando os pontos de adsorção para metais tóxicos e poluentes orgânicos (Vasudeva et al., 2025; Ashokkumar et al., 2025; Santana et al., 2025).

Esse processo contínuo de degradação de MPs primários e secundários leva a mudanças em suas propriedades físicas e químicas, como cor, morfologia da superfície, tamanho, cristalinidade e densidade. Essas alterações podem ter um impacto significativo em suas atividades químicas e físicas, influenciando os ambientes e as formas de vida (Tirkey; Upadhyay, 2021). Como resultado do alto uso de MPs primários e do hábito de “usar e descartar”, os plásticos são inseridos no ambiente e sofrem degradação lenta (Ji et al., 2024).

Os MPs surgiram como poluentes químicos emergentes significativos nesta era de produtos descartáveis e a sua presença é generalizada a nível mundial, particularmente nos ecossistemas da água e do solo. Estudos de monitoramento foram realizados em MPs em vários

ambientes, incluindo oceanos, solo, atmosfera, água doce e sedimentos (Li et al., 2024b). Nas últimas décadas, a proliferação de MPs se tornou um desafio global. Dada a meia-vida longa dos MPs, estendendo-se além dos 500 anos, seus efeitos tóxicos continuam se acumulando e ameaçando a sustentabilidade dos ecossistemas. A taxa alarmante de poluição plástica no planeta resultou em um acúmulo estimado de 5 trilhões de MPs nos oceanos causando um impacto devastador nos ecossistemas e na biota marinha (Ullah et al., 2025; Verma et al., 2024).

No ecossistema terrestre, as principais fontes de contaminação provêm de ações antropogênicas nos três setores: agrícola, industrial e doméstico. No setor agrícola, destaca-se o uso de filmes plásticos, estufas e fertilizantes de liberação controlada. Os setores industrial e urbano contribuem pelo manejo inadequado de resíduos, aplicação de lodo de esgoto, compostos orgânicos contaminados, desgaste de pneus e demarcação viária. Além disso, ocorre deposição atmosférica e dispersão por transporte hídrico e eólico (Islam; Cheng, 2024; Shi et al., 2024). O solo é o principal repositório de MPs, estima-se que para cada quilograma de solo a concentração de MPs pode variar de 0,01 a 600.000 miligramas. Esses MPs resultantes, não apenas persistem no solo, pois, por processos de escoamento superficial e infiltração atingem águas subterrâneas, rios e lagos que deságuam nos oceanos (Dagdelen; Turkeyilmaz; Esenbuga, 2025; Surendran et al., 2023; Yan et al., 2024).

A presença de MPs não se limita ao solo, água e ar, mas também em organismos marinhos, sal, cerveja e, recentemente, em água potável engarrafada em todo o mundo (Yang et al., 2024). A exposição aos MPs pode levar indiretamente à sua acumulação e deposição em tecidos e partes do corpo humano, por meio de animais e plantas, com potencial para alterar o sistema imunológico e causar outras complicações clínicas (Silva et al., 2024; O'Brien et al., 2023).

4.3 MPs e os possíveis danos à saúde humana

Os MPs podem ser absorvidos por ser humanos, animais marinhos e terrestres, ingressando na cadeia alimentar e ocasionando diversos danos, como obstrução intestinal, redução da fertilidade e até desregulação endócrina (Chang, 2022; Ji et al., 2024). A durabilidade e a resistência à degradação favorecem a persistência ambiental e a fragmentação em MPs, ampliando seu potencial de dispersão e interação em sistemas biológicos morte (Dagdelen; Turkeyilmaz; Esenbuga, 2025; Santana et al., 2025).

No organismo humano, os MPs podem ser incorporados por diferentes vias de exposição incluindo ingestão oral, inalação e contato dérmico, conforme evidenciado por estudos que identificaram MPs em alimentos, água potável, ar atmosféricos e tecidos humanos (Ibrahim et al., 2021; Leslie et al., 2022; Muhib et al., 2023). Estima-se que a ingestão média semanal alcance aproximadamente 5g de MPs por indivíduo (Muhib et al., 2023). A bioacumulação dessas partículas está associada a potenciais impacto à saúde, incluindo aumento do risco de carcinogênese, mutagênese, distúrbios do trato gastrointestinal, imunossupressão e alterações no sistema reprodutivo (Campisi; La Motta; Napierska, 2025; Rafa et al., 2024; Verma et al., 2024).

MPs com diâmetro inferior a 2,5 µm, quando inalados, podem ser internalizados por endocitose³, atingindo tecidos pulmonares e neurais, onde induzem estresse oxidativo, danos celulares, comprometimento do metabolismo lipídico, disfunções imunológicas e redução de função respiratória, estando associados ao desenvolvimento de asma e câncer pulmonar (Campisi; La Motta; Napierska, 2025; O'Brien et al., 2023). Adicionalmente, a exposição cutânea pode resultar em absorção de compostos químicos, irritação dérmica e indução de estresse oxidativo em células epiteliais (Campisi; La Motta; Napierska, 2025; Geueke et al., 2023).

Além dos efeitos diretos nos organismos, os MPs também podem adsorver poluentes persistentes (POPs), metais tóxicos, antibióticos e pesticidas, em sua superfície. Essa capacidade os torna transportadores de contaminantes, alcançando a cadeia alimentar e potencialmente impactando a saúde humana (Rafa et al., 2024; Santana et al., 2025). Os danos dos MPs aos sistemas humanos são diversos, no sistema nervoso os MPs degradam a barreira hematoencefálica, levando a alterações neurodegenerativas e anormalidades no neurodesenvolvimento, essas interrupções no desenvolvimento do sistema nervoso podem causar deficiência intelectual, Transtorno do Espectro Autista (TEA), Transtorno do Déficit de Atenção e Hiperatividade (TDAH) (Dagdelen; Turkyilmaz; Esenbuga, 2025; Shi et al., 2024). No sistema digestivo os MPs, desequilibram o ambiente intestinal, afetando os sistemas imunológico, metabólico e nervoso. No sistema reprodutivo, os MPs causam uma diminuição da fertilidade e da ovulação, apoptose das células da granulosa e baixa motilidade espermática (Rafa et al., 2024; Verma et al., 2024). No sistema respiratório os MPs induzem a inflamações

³ Endocitose é o processo pelo qual a célula incorpora substâncias do meio externo.

respiratórias e aumento na incidência de câncer pulmonar (Campisi; La Motta; Napierska, 2025). No sistema cardiovascular, os MPs causam inflamações pulmonares e trombose, intensificam a permeabilidade da barreira hematoencefálica humana e danificam as células nervosas do cérebro, podendo também ser transmitidos aos descendentes (He et al., 2025; Leslie et al., 2022). No sistema urinário, os MPs induzem a inflamação, estresse oxidativo do retículo endoplasmático nos rins, gerando lesões renais (Ashokkumar et al., 2025; Ullah et al., 2025). No sistema endócrino MPs estão associados a um aumento de espécies reativas de oxigênio, alteram o metabolismo lipídico, contribuindo para a resistência à insulina e um aumento de glicose no fígado. Muitos aditivos presentes nos MPs são desreguladores endócrinos, prejudicando a função da tireoide (Campisi; La Motta; Napierska, 2025; Rafa et al., 2024; Ragu Prasath; Sudhakar; Selvam, 2025; Shi et al., 2024). A Tabela 2 apresenta a concentração de MPs no corpo humano.

Tabela 2. Presença de MPs no corpo humano.

Contaminante	Presença	Concentração	Referência
MPs	Corrente sanguínea	1,6 µg.mL ⁻¹	(Leslie et al., 2022)
	Leite Materno	1,2 µg ± 0,6.mL ⁻¹	(Jaikumar et al., 2025)
	Feto e Placenta	6,5 a 790 por grama de tecido	(Wu et al., 2024)
	Fezes humanas	Média de 20 partículas/10 g de fezes humanas.	(Feisal et al., 2025)
	Pulmões humanos	Média de 0,69 ± 0,84 partículas/grama de tecido.	(Costa et al., 2024)
	Sistema nervoso (fluido cerebrospinal)	Média de 2,9 ± 1,12 µg.g ⁻¹	(He et al., 2025)
	Cólon	28,1 ± 15,4 partículas/g de tecido	(Ibrahim et al., 2021)

Fonte: Autor, 2026.

4.4 MPs e os possíveis danos ao meio ambiente

Efeitos ecológicos como a alteração de comunidades microbianas e destruição de ecossistemas também são observados (Fang et al., 2025). A biodiversidade no ecossistema terrestre é afetada, pela presença dos MPs que comprometem o crescimento de microrganismos, plantas e animais (Ullah et al., 2025). Os MPs podem alterar as características físicas do solo,

devido a sua superfície hidrofóbica alterando a capacidade de retenção da água no solo, diminuindo, portanto, a umidade do solo, condição essencial para a sobrevivência e reprodução das espécies (Shi et al., 2024). Os MPs interrompem a formação e estabilidade dos agregados do solo influenciando na porosidade do solo. Os MPs também afetam o crescimento das plantas, modificam a biomassa e processos de ciclagem de nutrientes e perturbam comunidades microbianas (Yang et al., 2024).

As concentrações de poliestireno entre 1% e 2% reduzem o crescimento e a sobrevivência de minhocas (*Eisenia fetida*) e outras espécies do solo, além de comprometerem seus sistemas de defesa. Outras espécies como *Enchytraeus crypticus* e *Aporrectodea rósea* também são prejudicadas pelas partículas de pneus e polietileno, mesmo em baixas concentrações. Tais impactos comprometem as suas funções ecossistêmicas desempenhadas por esses organismos, como a ciclagem de nutrientes e manutenção da estrutura do solo (Shi et al., 2024; Ullah et al., 2025; Verma et al., 2024).

Os MPs interferem também nas propriedades químicas do solo, pois os MPs alteram a atividade enzimática do solo (fundamental para os ciclos do C, N e P) e parâmetros como pH, condutibilidade elétrica e carbono dissolvido (DOC), comprometendo seu equilíbrio químico. O estudo de Yu et al. (2021) demonstrou que o PP, PE, PS e PVC alteraram a atividade da urease, com aumento após 60 dias de exposição, além de provocarem variações significativas nas características físico-químicas do solo.

As modificações causadas por MPs no solo podem afetar o crescimento, absorção de nutrientes e as características das raízes das plantas. O acúmulo de MPs nas raízes da fava (*Vicia faba*) causou um comprometimento genotóxico e desacelerou o seu crescimento (Jiang et al., 2019). As sementes de agrião (*Lepidium sativum*) após 8 horas de exposição a MPs (~4,8 µm) apresentaram taxa de germinação retardada, outras plantas como a alface italiana, azevém perene (*Circer arientinum*) e ornamentais herbáceas também tiveram suas taxas de germinação inibidas (Bosker et al., 2019). A cebola (*Allium fistuosum*) em contato com os MPs de PA, PE, PET, PES, PP e PS teve a sua biomassa total, características de folhas e composição foliar (C:N) alterados (Azeem et al., 2021). A abobrinha (*Cucurbita pepo L.*) apresentou maior toxicidade aos MPs de PVC (Colzi et al., 2022). O impacto dos MPs pode variar conforme o tamanho e a concentração, como no estudo de Lian et al. (2020) que descreveu que o trigo (*Triticum aestivum*) apresentou taxa de fotossíntese aumentada na presença dos MPs de PS (0,5µm, 100 mg/L), no entanto, Zong et al. (2021) realizaram esta avaliação com MPs de 100 nm, 0,10-10 mg/L e não observaram esse efeito.

No estudo de Nei et al. (2024) o tomate teve o seu peso, a densidade das flores, e frutos por cachos modificados negativamente com a exposição dos MPs de PVC menores que 10 μm , penetrados através das raízes. Essa infiltração alongou a raiz primária e lesionou a secundária, diminuiu a fotopigmentação e os processos metabólitos. Os MPs em plantas estão associados a limitações na absorção de nutrientes e água, alterações no perfil da expressão gênica e na produção de compostos fenólicos e outros metabólitos secundários foram observados em plantas expostas a MPs, sugerindo um estresse fisiológico generalizado (Ashokkumar et al., 2025).

Outros efeitos da presença dos MPs no solo, incluem danos ao DNA, alterações metabólicas, neurotoxicidade e estresse oxidativo (Ullah et al., 2025). O ecossistema terrestre concentra aproximadamente 79% dos resíduos plásticos, acumulados principalmente em aterros sanitários, contudo esses MPs podem ser transportados para o ecossistema aquático, e se adsorver a outros poluentes, aumentando ainda mais sua toxicidade e propagação (Shi et al., 2024; Verma et al., 2024).

A presença de MPs no solo e na água, tem implicações diretas e indiretas, uma vez no solo, esses contaminantes são ingeridos por plantas, microrganismos e pequenos invertebrados, o que abre caminho para a sua entrada nos níveis tróficos subsequentes (Surendran et al., 2023). O estudo de Huerta et al. (2017) identificou altos teores de MPs em solos de jardins, fezes de minhocas e galinhas, indicando que esses fragmentos podem ser transferidos de um organismo para outro, possivelmente chegando aos alimentos consumidos por seres humanos.

Os ecossistemas aquáticos representam o destino final dos MPs, concentrando organismos de água doce e marinha que desempenham funções ecológicas essenciais, inclusive em ambientes urbanos. Esses organismos são fontes de suprimento alimentício, atividades econômicas e oferecem benefícios ambientais. Vários organismos aquáticos, desde o zooplâncton microscópico, mexilhões, mariscos, es até mamíferos de grande porte, frequentemente, apresentam MPs, no trato digestivo em decorrência da alimentação, o que resulta em sérios impactos fisiológicos, como estresse oxidativo, danos internos, obstrução gastrointestinal, e a contaminação com substâncias tóxicas, causando desnutrição, afetando a reprodução e o crescimento saudável das espécies (Ashokkumar et al., 2025; Botterell et al., 2022; Espinosa; Esteban; Cuesta, 2019). Portanto, gerando bioacumulação ao longo da cadeia alimentar (Fu et al., 2021; Jaikumar et al., 2025). Na água doce, compostos tóxicos associados aos MPs, desencadeiam alterações comportamentais e fisiológicas, comprometendo a sobrevivência das espécies e a capacidade reprodutiva. Organismos fundamentais para o

equilíbrio ecológico como os insetos aquáticos têm sua população diminuída, resultando na fragmentação das redes tróficas. Uma vez no organismo, os MPs podem causar alterações em estruturas celulares, gerando um efeito citotóxico e prejudicando o funcionamento de componentes moleculares, como miRNA, em organismos marinhos. Além disso, os MPs podem se associar a patógenos e transportá-los, intensificando a disseminação de doenças em comunidades aquáticas (Adamu et al., 2024; Silva et al., 2024; Fu et al., 2021; Rafa et al., 2024).

4.5 MPs oriundos do Polietileno e Policloreto de vinila

O PVC expresso quimicamente como $[-CHClCH_2-]_n$ é o terceiro plástico mais utilizado após o PE. É produzido pela polimerização de monômeros de vinila, é polar e comercializado desde 1930 pela Alemanha, como polímero rígido (PVC – U) utilizado em automóveis, eletrônicos e na construção civil. Em sua forma flexível (PVC – P) pode ser utilizado na forma de embalagens, cabos fios e dispositivos móveis (Campisi; La Motta; Napierska, 2025; Nei et al., 2024; Xu et al., 2024).

Devido a sua versatilidade o PVC apresenta uma série de riscos à saúde humana, o estudo de Geueke et al. (2023) identificou 229 aditivos químicos transferidos das embalagens de PVC para os alimentos. Segundo o estudo de (Ha et al., 2025) o PVC pode atuar como transportador de metais tóxicos (Pb^{2+} e Cd^{2+}), especialmente quando envelhecido, devido à formação de grupos funcionais contendo oxigênio em sua superfície.

No campo da produção agrícola, a maioria das coberturas plásticas são PE, quimicamente expresso como $[-CH_2-CH_2-]_n$ representando 49%, 62,5% e 25% da Europa, Alemanha e China respectivamente. Estima-se que só nos Estados Unidos 263 mil toneladas são descarregadas na natureza anualmente (Jaikumar et al., 2025; Mo et al., 2021). O PE é composto de hidrocarbonetos de alto peso molecular saturados e apolares, possuindo duas categorias principais: Polietileno de alta densidade (PEAD) e o Polietileno de baixa densidade (PEBD). Os MPs de PE estão expostos, também em produtos de cuidados pessoais, como cremes e produtos de limpeza facial (Feisal et al., 2025). O PE compreende aproximadamente 90% do plástico total produzido e é extensivamente detectado no ambiente (Xu et al., 2024).

O estudo de Lee et al. (2024), relata que o PVC e o PEBD apresentaram efeitos tóxicos no metabolismo redox das minhocas (*Eisenia fetida*) com influência no seu mecanismo de defesa antioxidante e provocando disfunções mitocondriais, outros efeitos dos mesmos MPs foram observados no estudo de Huang et al. (2023) que em solos agrícolas alteraram

significativamente o ciclo do nitrogênio, com o aumento nas taxas de nitrificação e desnitrificação, associado à maior atividade da redutase do nitrato e à modulação de comunidades microbianas funcionais, como *Nitrosospira* e bactérias desnitrificantes, evidenciando o potencial dos MPs em interferir nos processos biogeoquímicos do solo. No ecossistema aquático a exposição dietética de robalos (*Dicentrarchus labrax*) aos MPs de PE e PVC induziram alterações histopatológicas hepáticas e intestinais, além de estresse oxidativo e imutotoxicidade, com efeitos mais severos associados ao PE (Espinosa; Esteban; Cuesta, 2019). Com base em He et al. (2025), a análise do líquido cefalorraquidiano (LCR)⁴ revelou uma disparidade notável nas concentrações de PE e PVC entre grupos amiloide-positivos e amiloide-negativos. Especificamente, níveis elevados de PE no LCR correlacionaram-se inversamente com as concentrações A β 42 no LCR e com pontuações reduzidas no Mini-Exame do Estado Mental (MMSE), sugerindo uma associação do PE com o declínio cognitivo relacionado à patologia amiloide (Alzheimer).

4.6 Interação entre MPs e pesticidas

Os pesticidas são compostos químicos com cerca de 1.000 compostos individuais essenciais no setor agrícola como defensores químicos. Entre os anos de 1990 e 2020, o uso total de pesticidas evoluiu de 2.285.881 para 4.113.591 toneladas, um aumento de 80% em ingredientes ativos (Wu et al., 2025). Os pesticidas incluem inseticidas, fungicidas, herbicidas, rodenticidas, moluscicidas e nematocidas (Li et al., 2024b). Aproximadamente 2.000 toneladas de pesticidas são usadas a cada ano em todo o mundo. Em geral, menos de 10% dos pesticidas aplicados para eliminar pragas em plantações atingem a área-alvo, ficando assim a maior parte no solo, interagindo com os MPs oriundos da degradação da cobertura plástica utilizada para reter calor e umidade e para inibir o crescimento de ervas daninhas em solos agrícolas. Pesticidas com meias-vidas longas tendem a se acumular no solo e a se misturarem com outros compostos (Mo et al., 2021; Wu et al., 2025).

Efeitos sinérgicos foram confirmados quando pesticidas são adsorvidos na superfície dos MPs, uma combinação poluente, pois, os MPs transportam estes pesticidas do solo do ambiente agrícola para os oceanos, originando novos poluentes e alterando sua biodisponibilidade (Fang

⁴ LCR é o fluido que circula no sistema nervoso central, protegendo e nutrindo o cérebro e a medula espinhal.

et al., 2025; Mo et al., 2021). Os estudos de Fang et al. (2025) demonstraram que pesticidas como atrazina, pirimazol e clorpirifós podem também se combinar com metais tóxicos (Cd, Cr e Zn) e MPs, sendo prejudiciais à saúde humana. Essas interações mencionadas ocorrem devido à grande área superficial e tamanho diminuto dos MPs. Os poluentes orgânicos hidrofílicos na maioria dos casos são adsorvidos nos MPs por interações eletroestáticas e ligação de hidrogênio. Os MPs podem adsorver Contaminantes Emergentes (CEs) e transportá-los (Jaikumar et al., 2025; Wisniewski et al., 2025).

O estudo de Mo et al., (2021), utilizando cálculos da Teoria Funcional da Densidade (DFT), confirmou que na co-exposição de dois pesticidas (Carbofuran e Carbendazim) com MPs de PE e PP, os MPs atuam como carreadores eficazes para pesticidas, transportando os pesticidas desde o solo agrícola até o ambiente aquático. No trabalho de Song; Yao, (2025) foram utilizados cálculos da química quântica para explorar a interação de herbicidas fenoxiacéticos com MPs de PE e PVC, demonstrando-se que o PVC exibe uma capacidade adsorptiva de herbicidas notoriamente superior ao PE, evidenciando o perigo inerente a essa associação, influenciado por forças de dispersão de London.

Em ambientes aquáticos, os MPs são expostos a uma mistura de substâncias e poluentes incluindo contaminantes emergentes (CEs) de diferentes classes. Por conta das suas propriedades físico-químicas dos MPs, como polaridade, cristalinidade, área superficial e hidrofobicidade dos contaminantes, hormônios, bisfenóis e pesticidas predominantemente hidrofóbicos são considerados poluentes alvos (Fu et al., 2021; Wisniewski et al., 2025).

A pesquisa de Wu et al. (2025) analisou a migração de 20 pesticidas em solo arenoso e relatou que a presença de MPs de PE a 1% aumentou significativamente a lixiviação de cinco pesticidas (S-metolachlor, Pendimethalin, Terbutylazine, Pretilachlor e Propachlor), reduzindo a capacidade de retenção do solo. Estes efeitos foram influenciados pelos coeficientes de partição carbono orgânico e octanol-água, K_{oc} e D_{ow} , que servem como indicadores da alteração da mobilidade dos pesticidas induzidos por PE. Em outro exemplo, observou-se que a adsorção entre partículas de PVC aumentou a toxicidade do imidacloprido (IMI, inseticida neonicotinoide) para dípero de água doce *Chironomus riparius* (Sun et al., 2024).

4.7 Características dos pesticidas 2,4-D, Tiametoxam e Clotianidina

O herbicida 2,4-D (ácido diclorofenoxido acético) é o terceiro mais utilizado no mundo, é usado para o controle de ervas daninhas de folhas largas, devido à sua eficácia e baixo custo

(Silva et al., 2024). No entanto, diversas pesquisas toxicológicas vêm demonstrando que este pesticida tem potencial para causar efeitos tóxicos no solo e na biota aquática como: o aumento da letalidade em animais expostos ao 2,4-D, citotoxicidade⁵, estresse oxidativo e efeitos genotóxicos⁶ em minhocas (Boughattas et al., 2024; Lu et al., 2025), danos no fígado de ratos (Li et al., 2024a) e em peixes-zebras (Gaaied et al., 2019). O uso excessivo de plásticos e 2,4-D na agricultura resulta na persistência prolongada e poluição nos solos agrícolas (Boughattas et al., 2024). O 2,4-D, Figura 1a, é um herbicida pertencente à família dos fenóxiácidos, amplamente utilizado, com quase oito décadas, para controle de ervas daninhas de folha larga, em sistemas aquáticos privados e públicos, com impactos significativos para sistemas ambientais e biológicos. No Brasil, país relevante no cenário agrícola, é o segundo agroquímico mais utilizado, com cerca de 62 mil toneladas vendidas em 2021 (Polido et al., 2025). No meio ambiente, o 2,4-D sofre biodegradação e decomposição por fotólise, liberando fenóis policlorados, que são mais tóxicos que o composto original. Em humanos o 2,4-D é considerado um desregulador endócrino por causar em baixas concentrações efeitos como: toxidade renal, danos a espermatogênese, redução do receptor de andrógeno e desequilíbrio de hormônios gonadais. Embora o uso de herbicidas tenha um papel crucial na produção de alimentos, os resíduos das aplicações podem contaminar os recursos hídricos através da lixiviação, escoamento e absorção (Gaaied et al., 2019; Silva et al., 2024).

O estudo de Thanomsit et al. (2025) avaliou os efeitos do herbicida 2,4-D dimetilamônio no camarão *Macrobrachium lanchesteri* (camarão Riceland) e demonstrou aumento da mortalidade com acréscimo do tempo de exposição e da concentração do contaminante. Os autores observaram ainda a redução progressiva dos valores de LC₅₀ ao longo do período experimental, bem como a diminuição do teor proteico e inibição da atividade de enzimas antioxidantes e neurotóxicas, como acetilcolinesterase (AChE), catalase (CAT) e glutathione S-transferase (GST), indicando indução do estresse oxidativo.

O Tiametoxam (TMX) e Clotianidina (CLO) Figura 1b, são outros pesticidas orgânicos sintéticos pertencentes a classe dos neonicotinóides (NNIs) mundialmente utilizados devido sua eficácia com a atividade inseticida atribuída, principalmente, à sua ação nos receptores de acetilcolina (nAChRs). Devido à sua eficácia de amplo espectro de atividade inseticida e

⁵ Citotoxicidade: é a capacidade de uma substância de causar dano ou morte às células.

⁶ Genotoxicidade: é a capacidade de uma substância de danificar o DNA, podendo causar mutações.

potente impacto neurotóxico em pragas alvos, o TMX, é muito utilizado no setor agrícola, tornando-o inevitável a sua crescente liberação no ecossistema aquático por meio do escoamento agrícola (Sun et al., 2024).

Os NNIs adsorvidos na superfície do MPs podem aumentar a solubilidade deste último e, assim, intensificar seu efeito nocivo no ambiente aquático. A exposição ao TMX tem correlação positiva com impactos deletérios em organismos aquáticos, como, estresse oxidativo e efeitos neurotóxicos, devido a sua alta solubilidade em água (De Oliveira et al., 2010; Sun et al., 2024; Zhang et al., 2024).

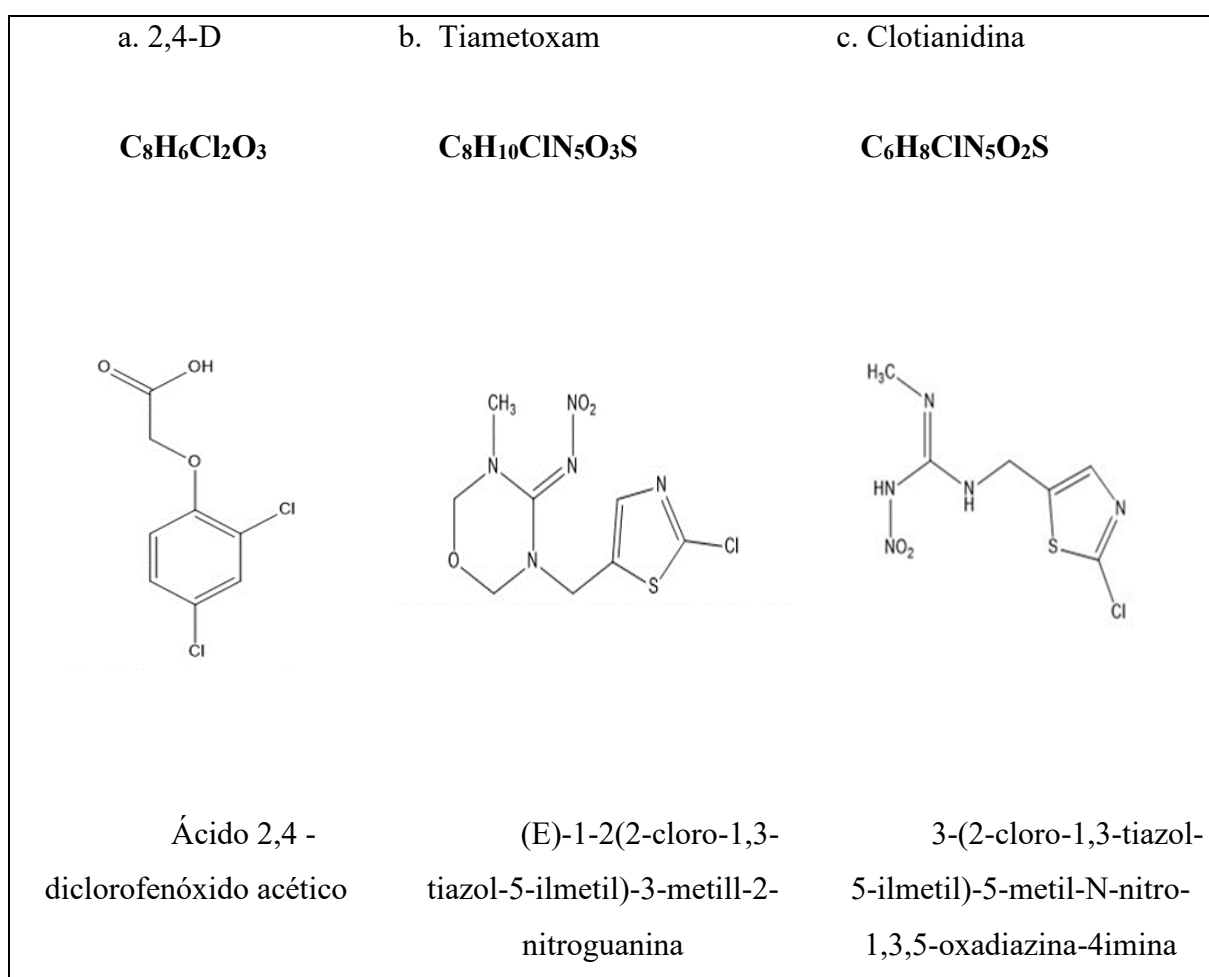
Um dos principais efeitos do TMX é a alta persistência no solo, com um valor de meia-vida variando de dias a anos, dependendo do clima predominante e dos tipos de solo. Os processos de adsorção são fundamentais para compreender seu transporte e mobilidade, e pesquisas demonstram que as propriedades físico-químicas do solo, como capacidade de troca catiônica, matéria orgânica, temperatura e pH, influenciam diretamente na afinidade de adsorção do TMX (Hu et al., 2023; Li et al., 2025). Segundo De Carvalho et al., (2024), o TMX apresenta elevada estabilidade frente a variações de pH e temperatura, mantendo-se estável até 60°C. Contudo a radiação solar em meio ácido promove a fotodegradação no meio ambiente, com produtos permanecendo tóxicos. Na pesquisa de Zhang et al. (2024) sobre a adsorção de inseticidas NNIs, por MPs envelhecidos de PE e Polibutileno (PBAT) foi observado um aumento na toxicidade e inibição no crescimento de *Escherichia coli* e na germinação de sementes de alface evidenciando o impacto dessa interação.

Apesar da concepção inicial dos NNIs visar seletivamente os receptores nicotínicos de acetilcolinesterase (nAChRs) de insetos, um estudo de Li et al. (2025) relatou que o TMX em concentrações ambientalmente relevantes, induziu a neurotoxicidade em larvas do peixe-zebra (*Danio rerio*) através da ligação do TMX com nAChR e a múltiplos receptores hormonais, desregulando funções neurais essenciais.

Outro inseticida pertencente a classe dos NNIs mais comumente utilizados é a Clotianidina (CLO) figura 1c, conhecida por sua distinta neurotoxicidade para praga-alvos e baixa toxicidade para mamíferos e estabilidade ambiental, porém, para organismos não-alvos como abelhas, apresentou toxicidade pronunciada. Adicionalmente, estudos relatam outros efeitos como desregulação endócrina, imunotoxicidade, bem como sua alta solubilidade em água e persistência no meio ambiente (Luo et al., 2025; Zhang et al., 2024). Efeitos sinérgicos neurotóxicos em larvas de peixe-zebra (*Danio rerio*) foram encontrados na coexistência de CLO e dos MPs fotoenvelhecidos (Ding et al., 2025). Essa interação também inibiu a taxa de

ganho de peso e o índice hepatossomático no camarão (*Penaeus vannamei*), além de alterações na defesa imunológica, metabolismo energético e sinalização neural (Luo et al., 2025). No estudo de Liu et al. (2025) sobre inseticidas em peixes selvagens de água doce, a CLO se destacou pela maior frequência de detecção no fígado e músculo (35,26% e 53,39% respectivamente), reforçando a necessidade de monitoramento contínuo para controle ambiental.

Figura 1. Estruturas 2D dos pesticidas.



Fonte: Autor, 2026

4.8 Química Computacional

A química computacional abrange uma ampla gama de métodos usados para explorar e compreender sistemas químicos. A Química Quântica (QC) é uma das abordagens mais empregadas por oferecer descritores químicos teóricos independentes de experimentos e por

fornecer interpretações precisas das relações estrutura-propriedade com base na distribuição eletrônica molecular (Dohnal, 2024).

Dentre os métodos mais utilizados atualmente em cálculos de QC, destaca-se a Teoria do Funcional da Densidade (DFT- *Density Functional Theory*), amplamente aplicada no estudo de processos de adsorção, para determinar o poder de adsorção de um dado adsorvente em relação a um poluente como aqueles envolvendo interações entre pesticidas e MPs, devido ao seu custo-efetividade e precisão elevados (De Souza; Meegoda, 2024; Malloum et al., 2023). A DFT baseia-se nos teoremas de Hohenberg-Kohn, que estabelecem que as propriedades do estado fundamental de um sistema eletrônico podem ser determinadas a partir da densidade eletrônica, reduzindo consideravelmente a complexidade do problema. Essa abordagem permite a obtenção de parâmetros fundamentais sobre as moléculas, otimizando suas geometrias, calculando propriedades eletrônicas como Mapas de Potencial Eletroestático (MEP – *Molecular Electrostatic Potential*), e dados termodinâmicos, que são fundamentais para compreender as interações intermoleculares entre as espécies químicas (Xue et al., 2024).

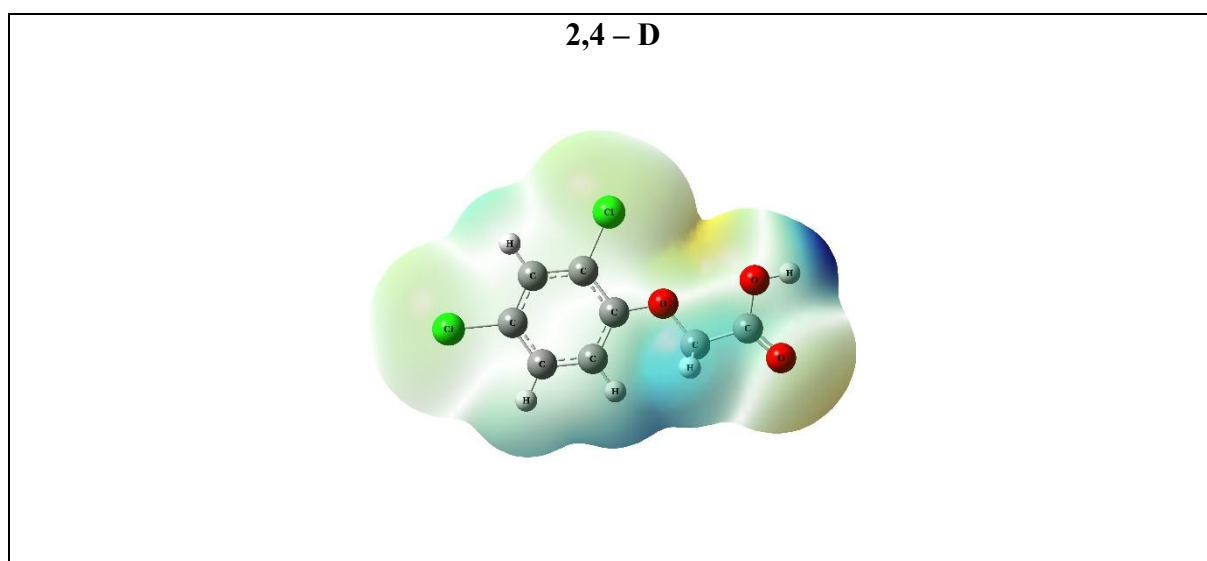
A aplicação da química computacional no estudo de mecanismos de adsorção tem se consolidado como uma estratégia eficaz, principalmente por permitir a avaliação prévia do trabalho experimental, reduzindo o número de materiais candidatos a serem testados experimentalmente (Malloum et al., 2023). O estudo de Jung et al. (2025) analisou as interações entre contaminantes e superfícies adsorventes, utilizando cálculos DFT, observando que a presença de MPs diminuiu a degradação do fenantreno em processos oxidativos. Outro estudo de Zhao et al. (2024) investigou o mecanismo de adsorção da cefradina em MPs (PVC, PE, PS) utilizando os cálculos DFT e os resultados obtidos indicaram que adsorção é um processo espontâneo e exotérmico, favorecido por ligações de hidrogênio e interações de van der Waals, ressaltando a relevância da DFT para compreensão precisa dessas interações.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Análise de possíveis locais de interação

Inicialmente foram analisados os MEPs para os pesticidas 2,4-D, TMX e CLO e para os MPs PVC e PE. Em geral, o MEP ilustra a distribuição de cargas nas moléculas tridimensionalmente, indicando a polaridade, reatividade e regiões com excesso e deficiência de elétrons. O MEP pode ser avaliado em termos de cores, em que a cor azul representa o potencial positivo do composto, a cor verde o potencial neutro e o vermelho o potencial negativo. As regiões de cor azul, possuem baixa densidade de elétrons, as de cor vermelha apresentam uma alta densidade de elétrons (Chatterjee et al., 2024; Mol; Aruldas; Joe, 2022). Dessa forma, o MEP é importante para determinar áreas reativas nas moléculas. Os resultados dos MEPs estão representados nas Figuras 2 (a), 2 (b), 2 (c), 2 (d) e 2 (e).

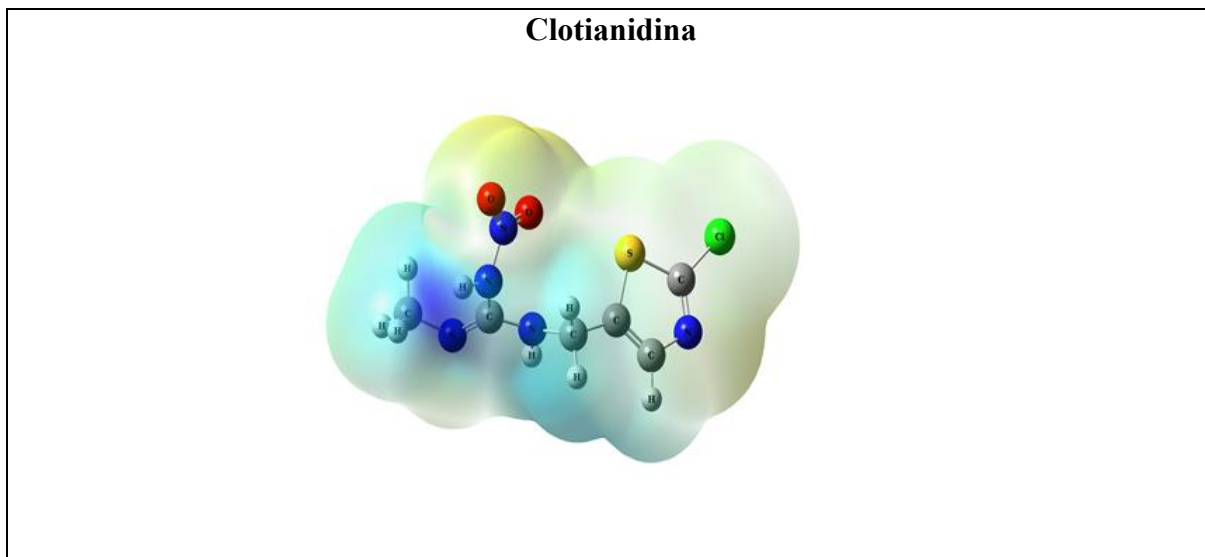
Figura 2 (a). Mapa de Potencial Eletroestático do 2,4-D.



Fonte: Autor, 2026.

Analisando os resultados do MEP para a molécula de 2,4-D (Figura 2.a), é possível observar a predominância de regiões azul eletrofílica com carga positiva nos hidrogênios, com um azul intenso ao redor do átomo de hidrogênio da carboxila. Também observa-se regiões neutras (verdes) particularmente ao redor dos átomos de cloro e uma região avermelhada sobre os oxigênios.

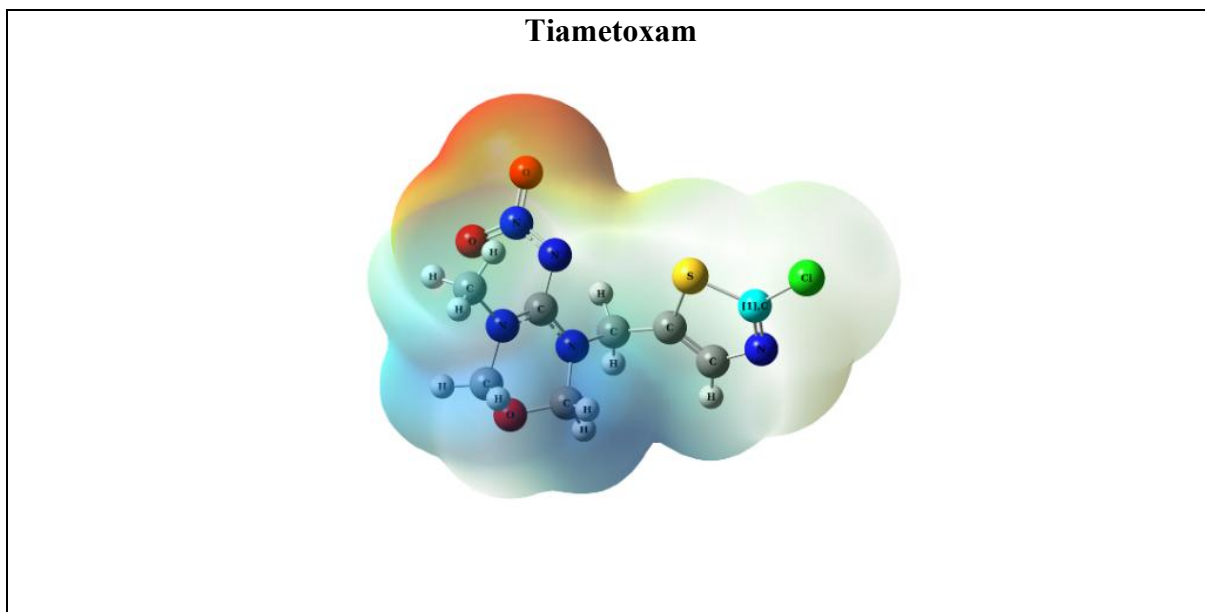
Figura 2 (b). Mapa de Potencial Eletroestático da Clotianidina - CLO.



Fonte: Autor, 2026.

Na molécula de Clotianidina (Figura 2.b), observa-se uma predominância de regiões verdes por toda molécula e apenas ao redor do grupo nitro ($-NO_2$) é possível observar uma região de cor amarela/avermelhada, devido a eletronegatividade do grupo. Um potencial positivo entorno do grupo metil também é observado na CLO.

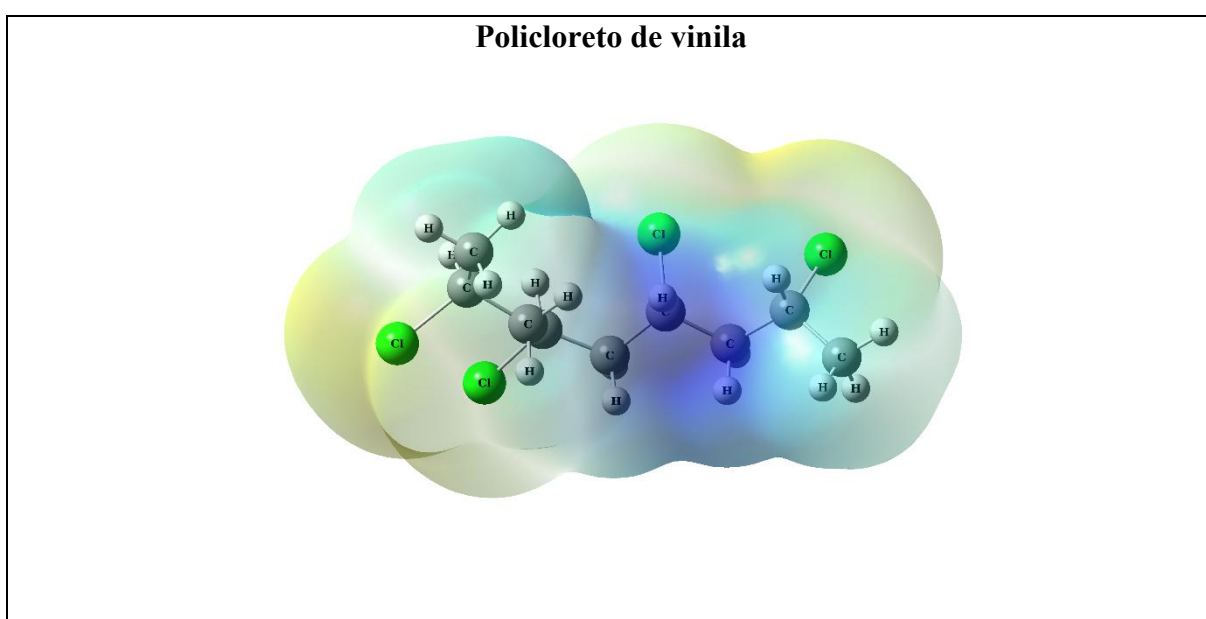
Figura 2 (c). Mapa de Potencial Eletroestático de Tiametoxam - TMX.



Fonte: Autor, 2026.

Na molécula de Tiametoxam (Figura 2.c), o grupo nitro - NO₂ tem a tonalidade vermelha, pois, contém dois átomos eletronegativos que concentram elétrons. A cor azul indica regiões pobres em elétrons que preferem reagir com moléculas nucleofílicas estas regiões que decorrentes dos hidrogênios da molécula. Para os pesticidas, observa-se nos MEPs que o TMX apresentar a maior distribuição desigual de cargas, portanto maior polaridade em relação aos outros pesticidas.

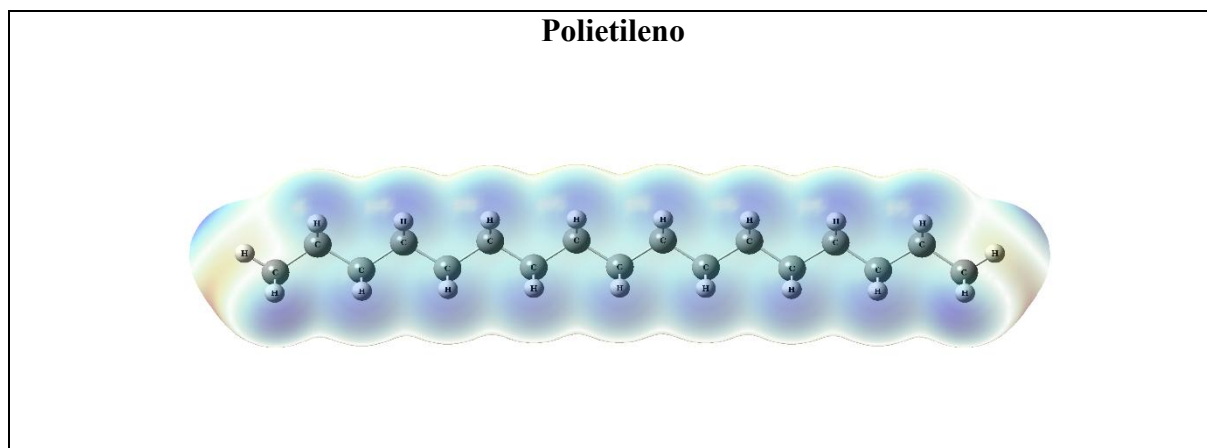
Figura 2 (d). Mapa de Potencial Eletroestático do Policloreto de vinila.



Fonte: Autor, 2026.

A molécula de PVC (Figura 2.d) apresentou maior polaridade devido a presença dos átomos de cloro, nota-se algumas regiões de cor verde, com um maior potencial eletroestático em relação as outras regiões eletrofílicas nos hidrogênios de cor azul, demonstrando que a molécula não possui distribuição igualitária de elétrons.

Figura 2 (e). Mapa de Potencial Eletroestático do Polietileno.



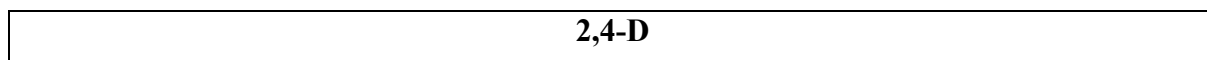
Fonte: Autor, 2026.

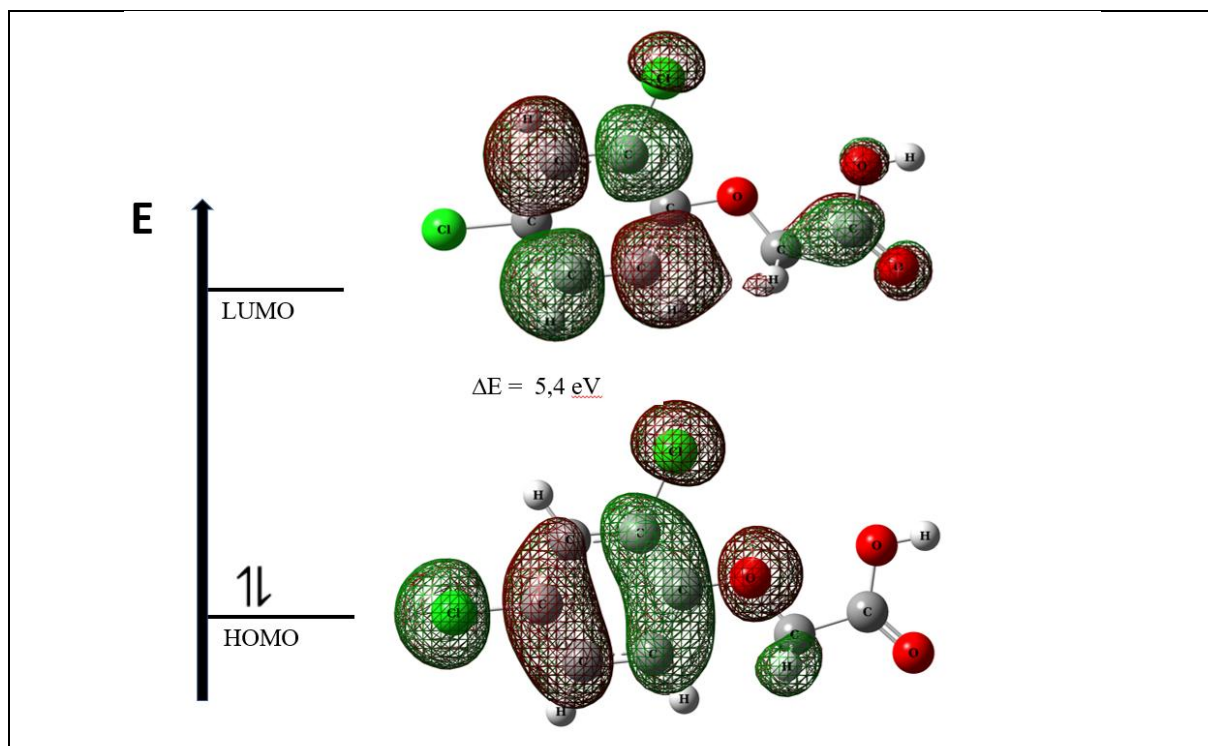
No PE (Figura 2.e), há a predominância de uma coloração azulada sobre os hidrogênios, e uma distribuição homogênea de cargas justificando a apolaridade do PE.

5.2 Orbitais Moleculares de Fronteira

Os Orbitais Moleculares de Fronteira (Frontier Molecular Orbitals - FMOs), desempenham um papel importante nas características químicas das moléculas e a possibilidade de novas ligações ou interações. O HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*) representa o orbital doador de elétrons e o LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*) o orbital receptor de elétrons. A diferença entre o HOMO-LUMO é chamada de energia gap (E_{gap}) e quanto maior for a diferença, maior será a barreira energética para a transferência de um elétron do HOMO para o LUMO, demonstrando baixa reatividade e alta estabilidade da molécula de estudo (Alimnazarov et al., 2024; Santana et al., 2025). As Figuras 3 (a), 3 (b), 3 (c), 3 (d) e 3 (e) apresentam as superfícies de isodensidade mapeados dos FMOs das moléculas.

Figura 3 (a). Gráficos de isodensidade dos orbitais moleculares FMOs do 2,4-D.



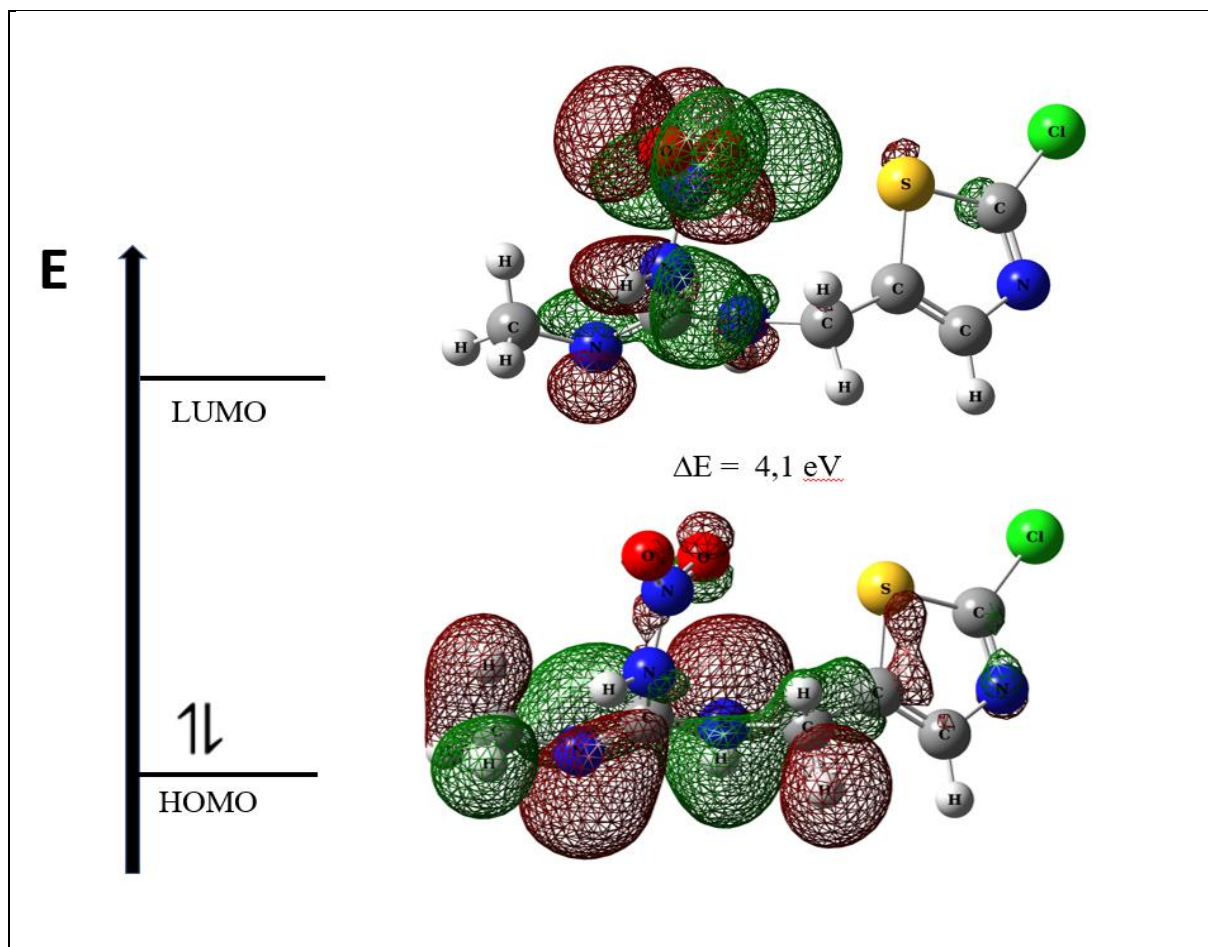


Fonte: Autor, 2026.

De acordo com a representações dos FMOs da Figura 3.a para o 2,4-D, a ligação carbono-carbono do anel aromático contém o LUMO deslocalizado de natureza π . O HOMO está posicionado também sobre o anel com contribuição adicional dos átomos de cloro, portanto, os sítios ricos e deficientes em elétrons, dependem do anel aromático.

Figura 3 (b). Gráficos de isodensidade dos orbitais moleculares FMOs da CLO.

CLO

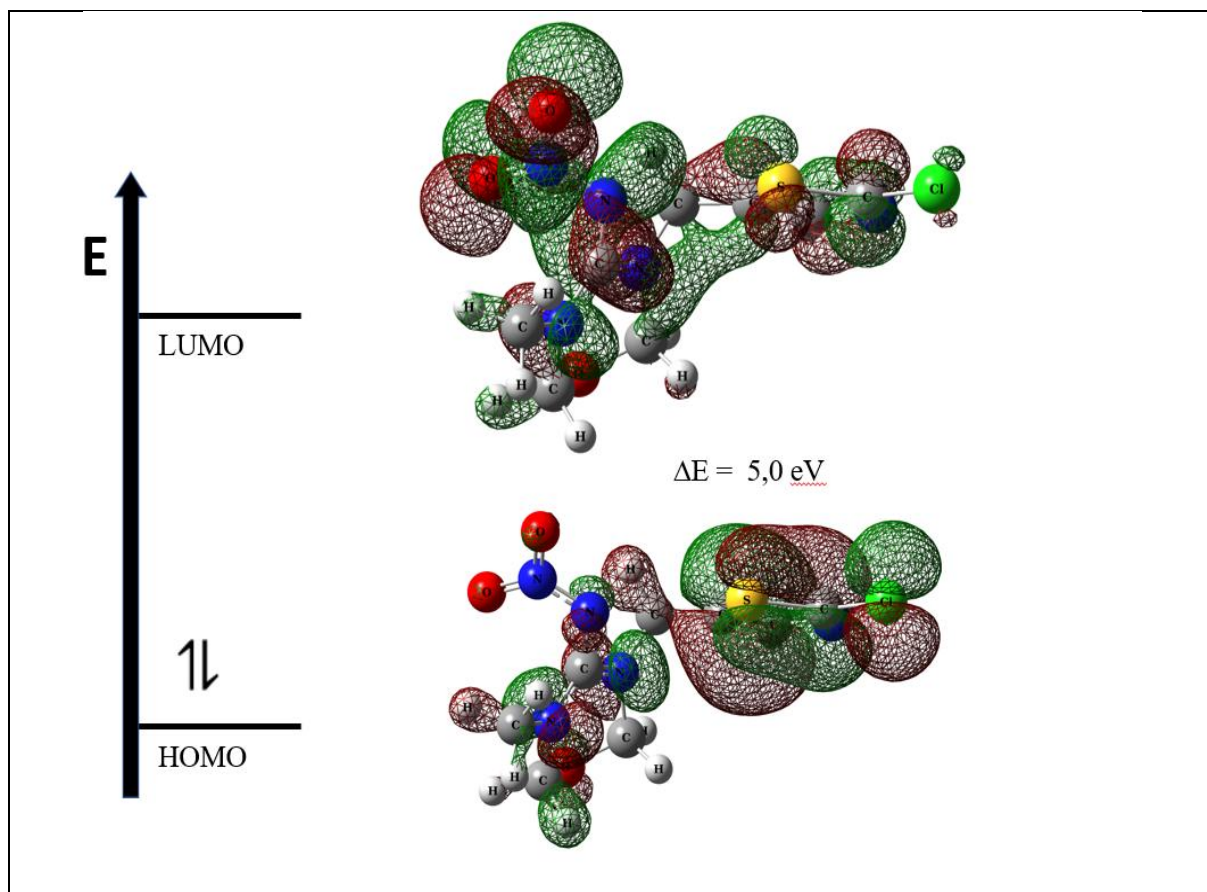


Fonte: Autor, 2026.

Na Figura 3.b., na molécula de CLO, o orbital HOMO está localizado principalmente grupo funcional nitroguanidino e na região acíclica da molécula, a distribuição do LUMO é semelhante, exceto no grupo nitro.

Figura 3 (c). Gráficos de isodensidade dos orbitais moleculares FMOs do TMX.

TMX



Fonte: Autor, 2026.

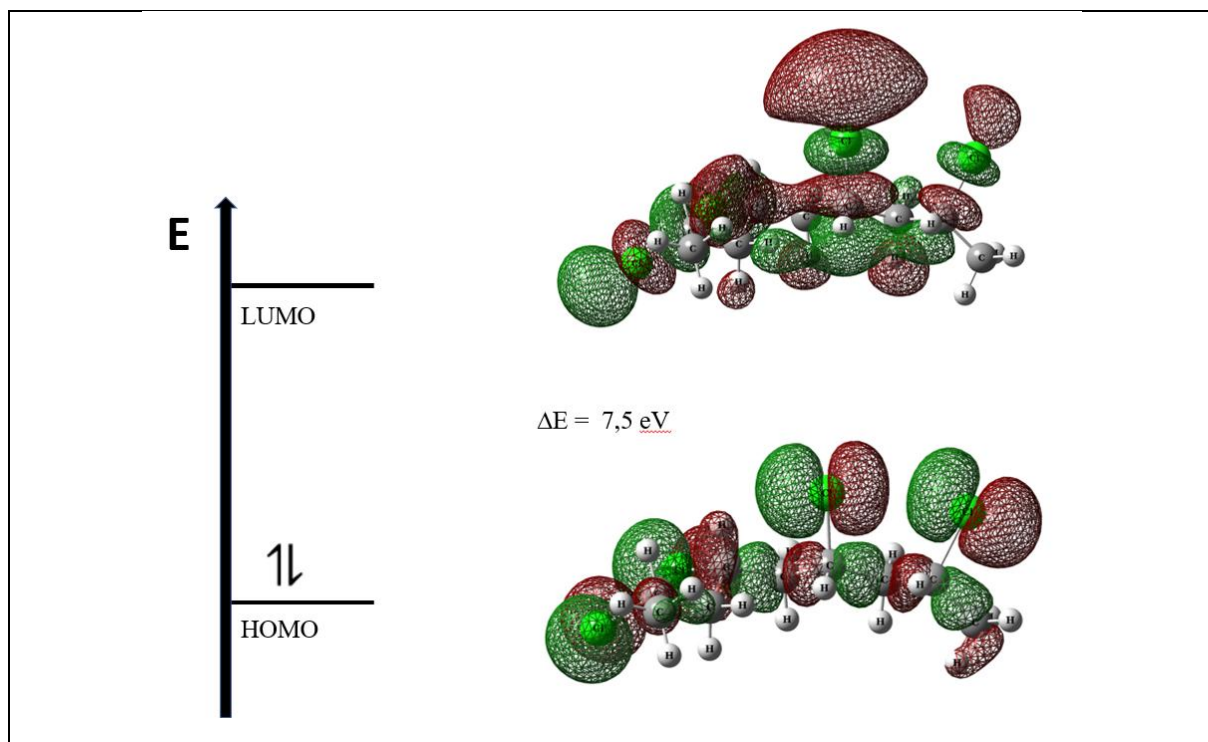
Na molécula de TMX, a superfície do LUMO está por toda molécula, principalmente no grupo funcional nitroguanidino, exceto no átomo de cloro e hidrogênios, a densidade eletrônica do HOMO está localizada no heterocíclico tiazol, com uma pequena contribuição do outro heterocíclico oxiadiazina, com ausência no grupo nitro.

A reatividade do TMX aumenta significativamente sob radiação solar, devido à transição para o estado tripleto excitado, que reduz o E_{gap} e favorece interações químicas. Essa diminuição energética intensifica a afinidade do TMX por espécies iônicas em solução e por superfícies de MPs (De Carvalho et al., 2024).

Analisando o HOMO e LUMO para os sistemas estudados é possível observar que para os pesticidas as diferenças de energia HOMO - LUMO ficaram entre 4,1 V e 5,4 V, esses resultados refletem moléculas com reatividade química e biológica moderada.

Figura 3 (d). Gráficos de isodensidade dos orbitais moleculares FMOs do PVC.

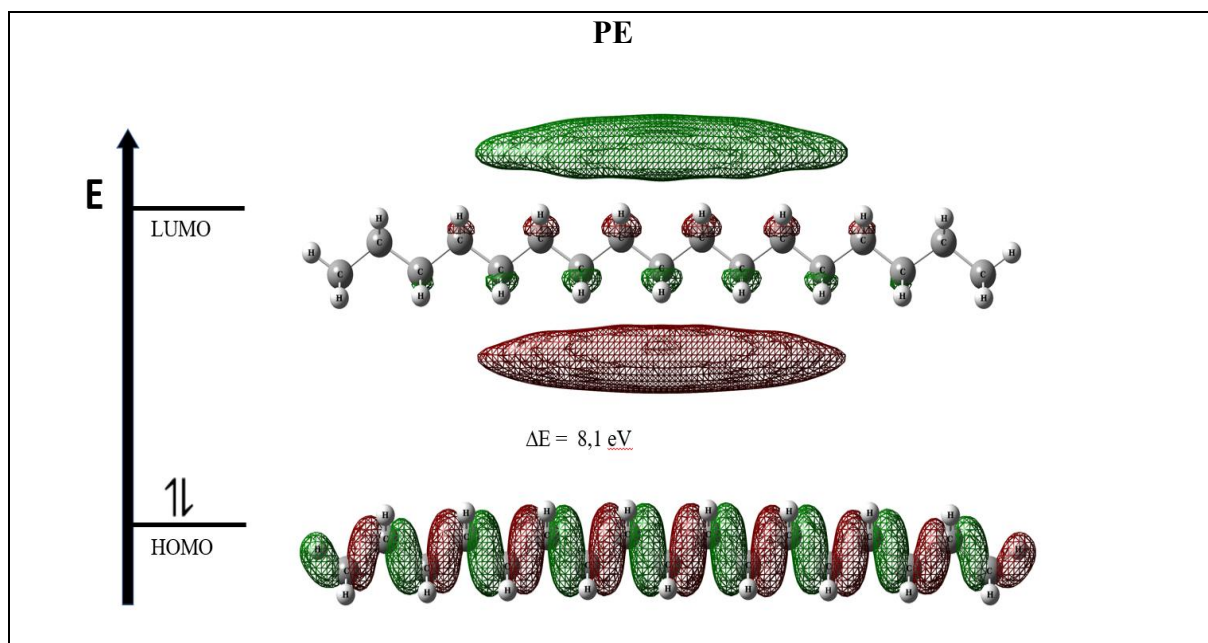
PVC



Fonte: Autor, 2026.

Na molécula de PVC (Figura 3.d) a distribuição do LUMO e do HOMO são semelhantes.

Figura 3 (e). Gráficos de isodensidade dos orbitais moleculares FMOs do PE.



Fonte: Autor, 2026.

Na molécula de PE (Figura 3.e), o HOMO apresenta uma distribuição linear enquanto o LUMO a distribuição de elétrons está fora da molécula, comum em hidrocarbonetos. Estes dois polímeros apresentaram E_{gap} de respectivamente 7,5 eV e 8,1 eV, indicando que estas moléculas apresentam estabilidade e capacidade isolante.

Essa estabilidade nos MPs de PE e PVC puros, podem ser alteradas, através do envelhecimento do meio ambiente. O Envelhecimento oxidativo de cadeias e inserção de oxigênio na superfície de MPs como PE e PVC, aumenta o índice de carbonila, a razão O/C e a abundância de grupos hidroxila, carbonila e carboxila. Essas transformações químicas resultam em maior rugosidade, microfissuras, aumento da área superficial específica, uma diminuição nas dimensões das partículas, redução da cristalinidade e maior heterogeneidade de sítios ativos. Em PVC ocorre a desidrocloração e formação de polienos, enquanto no PE predomina a oxidação progressiva da cadeia C-C mediada por radicais. Consequentemente, há alterações da hidrofobicidade e da distribuição de cargas, modificando a afinidade por contaminantes e interações (Jiang et al., 2022; Lee et al., 2024; Wang et al., 2023) .

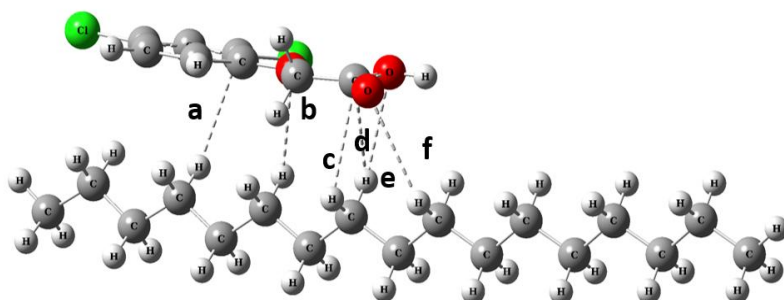
5.3 Propriedades Estruturais

A partir dos resultados dos FMOs e dos MEPs, realizou-se os cálculos de interação entre os pesticidas e as matrizes adsorptivas. Os resultados para as matrizes PE e PVC estão representados nas Figuras 4 e 5 que apresentam os parâmetros estruturais da formação dos complexos e seus respectivos comprimento de ligação calculados em até 3,00 Å. Desta forma, diferentes hipóteses de interações foram otimizadas, resultando em 19 configurações de complexos estruturalmente estáveis, denominados como: PE...2,4-Dⁱ, PE...2,4-Dⁱⁱ, PE...2,4-Dⁱⁱⁱ, PE...2,4-D^{iv}, PE...CLOⁱ, PE...CLOⁱⁱ, PE...CLOⁱⁱⁱ, PE...TMXⁱ, PE...TMXⁱⁱ, PE...TMXⁱⁱⁱ e PE...TMX^{iv}. Com a matriz adsorptiva PVC foram denominados como: PVC...CLOⁱ, PVC...CLOⁱⁱ, PVC...CLOⁱⁱⁱ, PVC...2,4-Dⁱ, PVC...TMXⁱ, PVC...TMXⁱⁱ, PVC...TMXⁱⁱⁱ e PVC...TMX^{iv}.

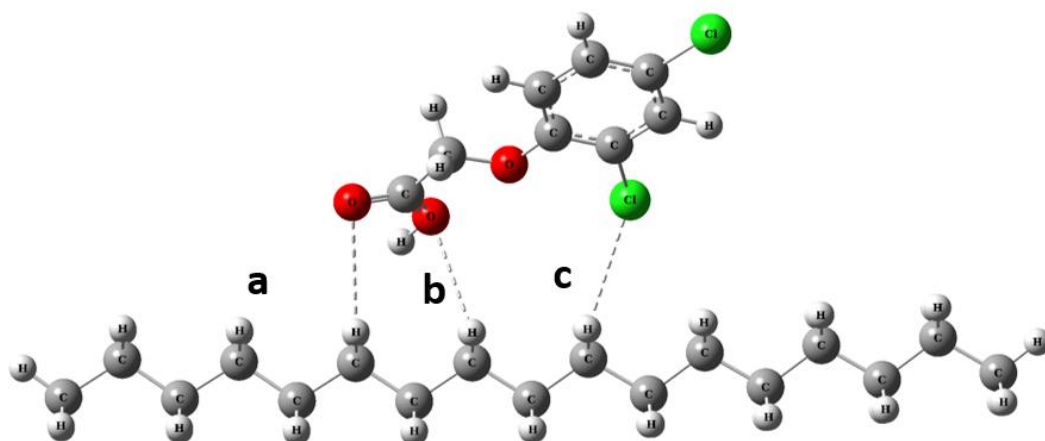
Na Figura 4(a), 4(b) e 4(c) estão representadas respectivamente as possíveis interações do adsorvente PE com os agrotóxicos 2,4-D, CLO e TMX. Os resultados das distâncias de interação estão descritos na Tabela 3. É possível observar que os comprimentos de ligação dos sistemas variaram de 2,432 Å a 2,995 Å.

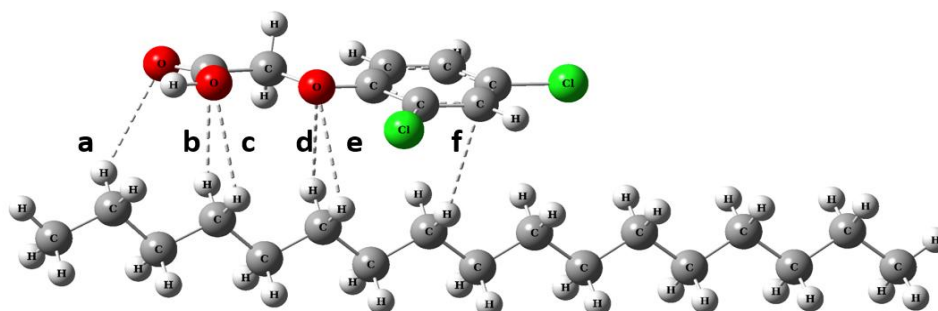
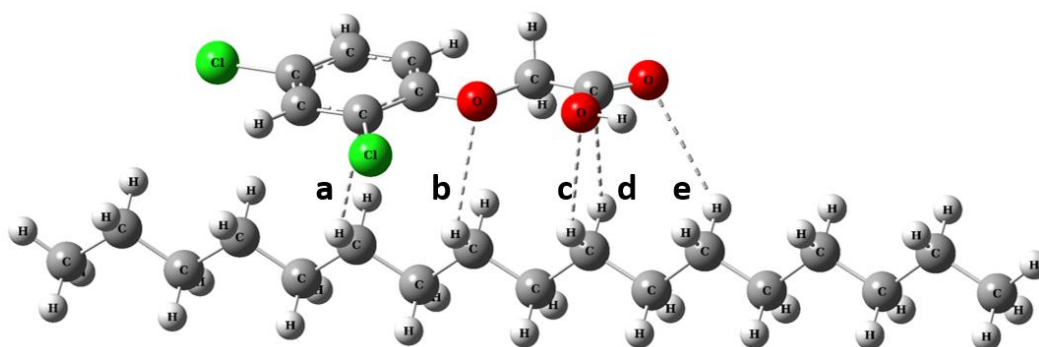
Figura 4(a). Representações estruturais do adsorvente PE para: PE...2,4-Dⁱ, PE...2,4-Dⁱⁱ, PE...2,4-Dⁱⁱⁱ, PE...2,4-D^{iv}.

PE...2,4-Dⁱ



PE... 2,4-Dⁱⁱ,

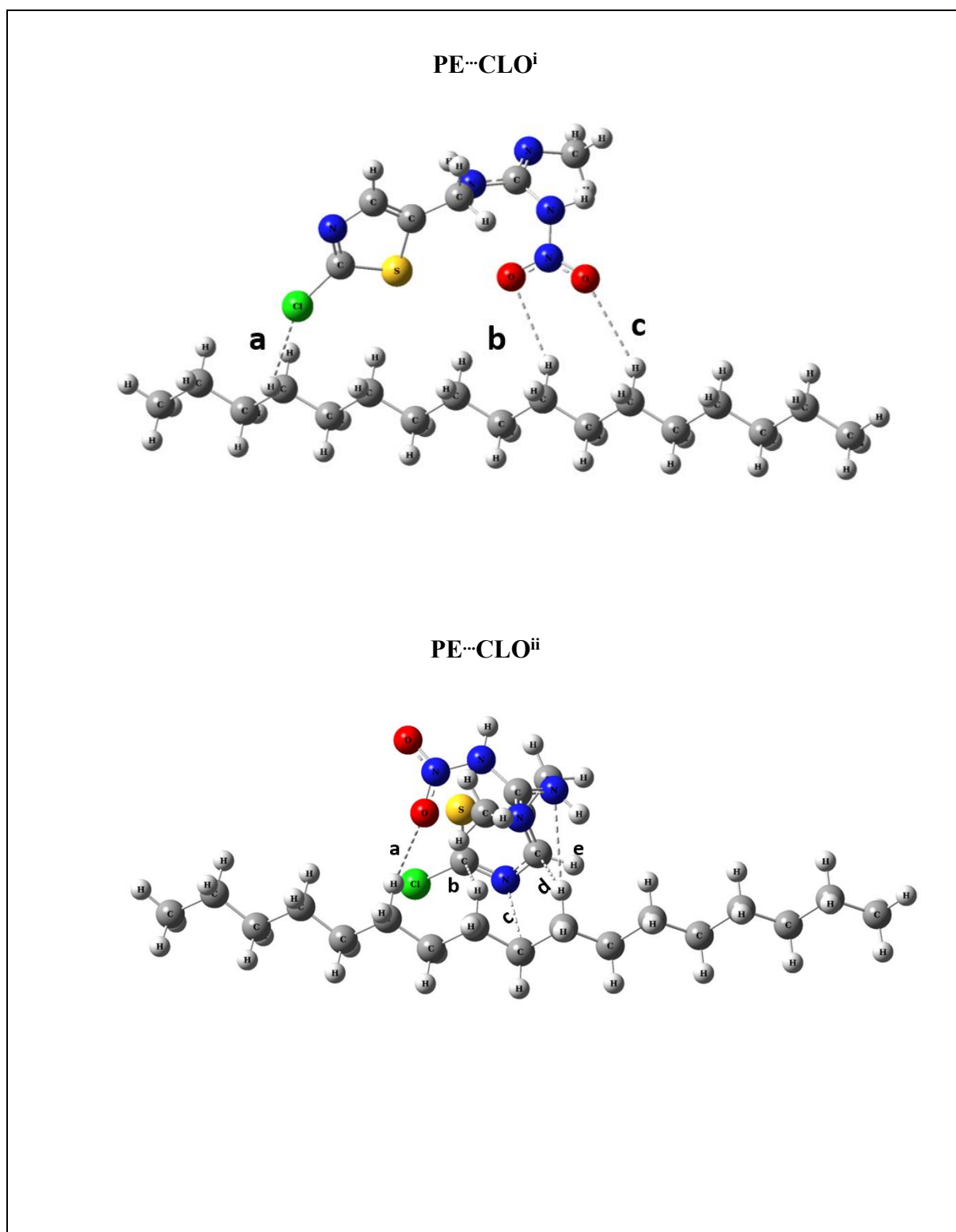


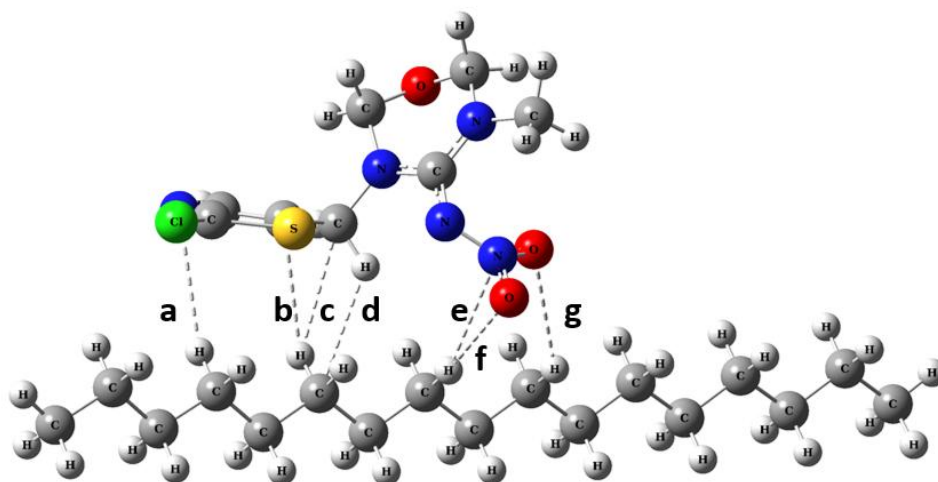
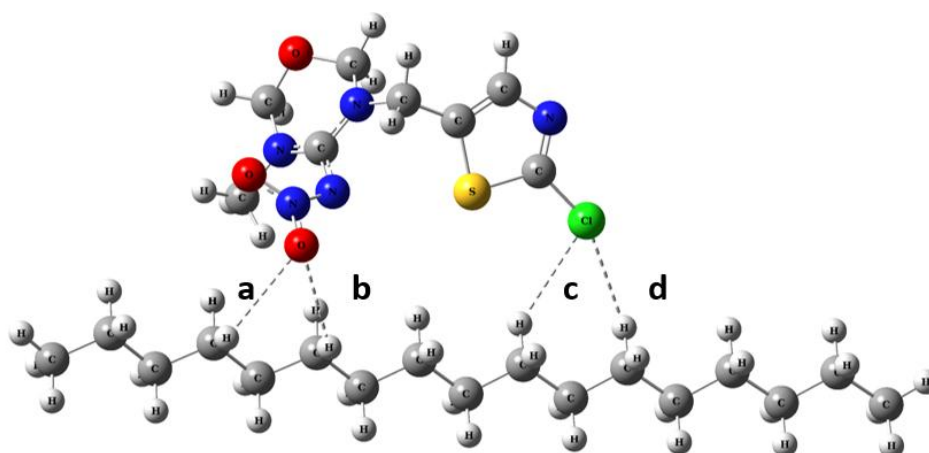
PE...2,4-Dⁱⁱⁱ,PE...2,4-D^{iv}

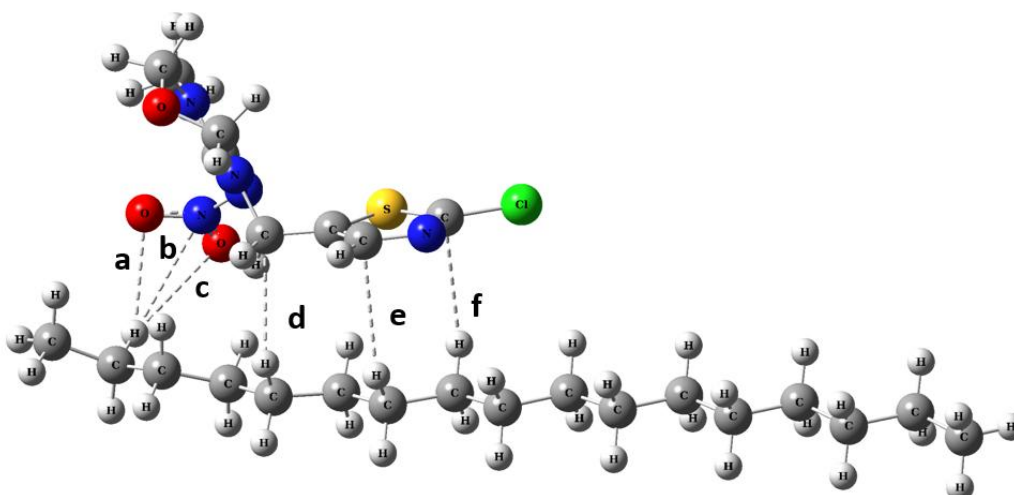
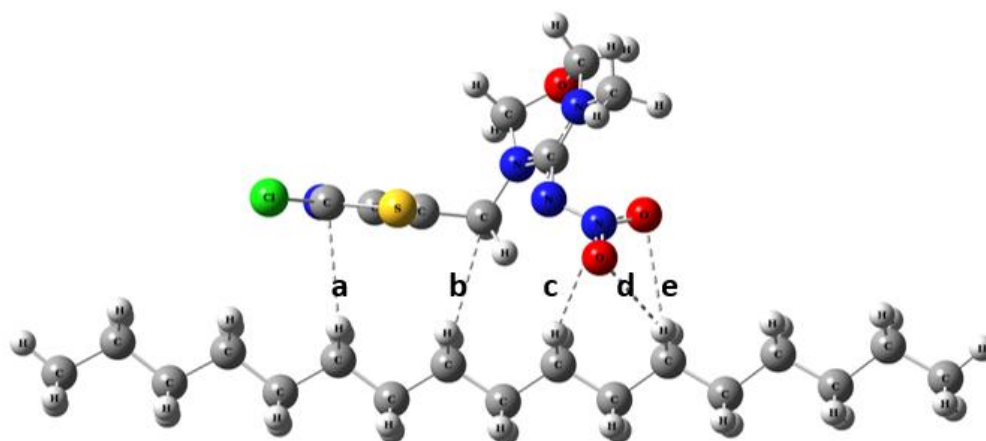
Fonte: Autor, 2026.

Analisando os resultados é possível observar que para o sistema PE...2,4-D quatro complexos foram estáveis, em que, os menores comprimentos de ligação encontrados foram: PE...2,4-Dⁱ, com distância de 2,753 Å nos átomos O63...H25 e 2,970 Å nos átomos C65...H25; PE...2,4-Dⁱⁱ, com 2,812 Å nos átomos O63...H31 e 2,987 Å nos átomos Cl57...H25; PE...2,4-Dⁱⁱⁱ, de 2,734 Å nos átomos O65...H13 e 2,995 Å e O67...H6 e PE...2,4-D^{iv}, com 2,762 Å nos átomos O65...H31 e 2,990 Å nos átomos O62...H37.

Figura 4(b). Representações estruturais do adsorvente PE para: $\text{PE}\cdots\text{CLO}^{\text{i}}$, $\text{PE}\cdots\text{CLO}^{\text{ii}}$, $\text{PE}\cdots\text{CLO}^{\text{iii}}$.



PE...TMXⁱ**PE...TMXⁱⁱ****PE...TMXⁱⁱⁱ**

PE...TMX^{iv}

Fonte: Autor, 2026.

O sistema PE...TMX apresentou quatro complexos estáveis, em que os menores valores encontrados foram de: PE...TMXⁱⁱⁱ, com distância de 2,607 Å nos átomos O70...H49 e 2,940 Å nos átomos N69...H49 e PE...TMX^{iv}, com 2,703 Å nos átomos O70...H36 e 2,917 Å nos átomos C79...H18. Os outros valores intermediários estão descritos na tabela 3.

Tabela 3. Análise estrutural das interações para os complexos formados entre o PE e contaminantes.

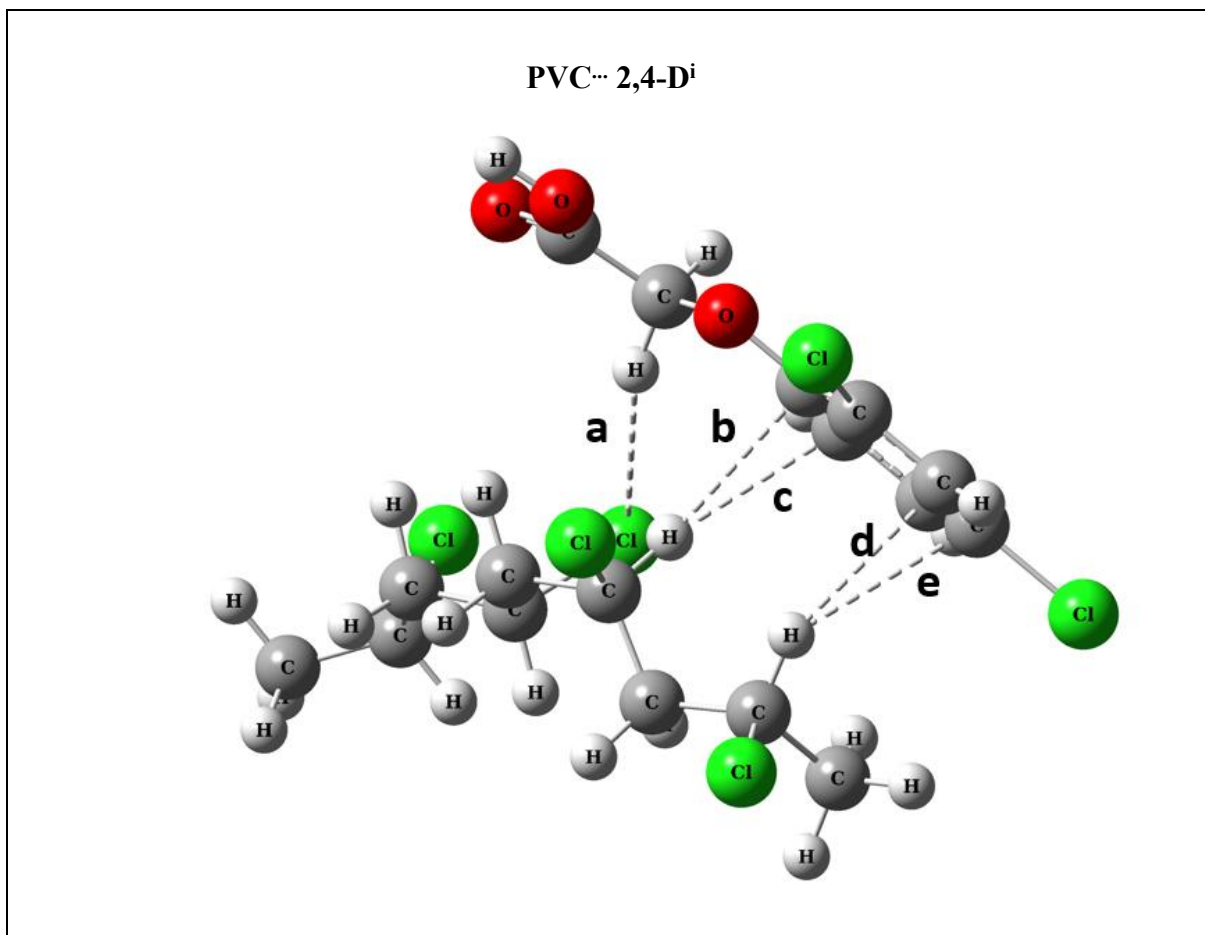
Sistemas	Interações	Átomos	Distância (Å)
PE...2,4-D ⁱ	a	H13...C72	2,930
	b	H24...C65	2,853
	c	H24...C65	2,877
	d	H25...O63	2,753
	e	H25...C65	2,970
	f	H30...O62	2,955
PE...2,4-D ⁱⁱ	a	H30...O62	2,924
	b	H31...O63	2,812
	c	H25...Cl57	2,987
PE...2,4-D ⁱⁱⁱ	a	H6...O67	2,995
	b	H12...O63	2,803
	c	H13...O65	2,734
	d	H18...O58	2,908
	e	H19...O58	2,977
	f	H24...C70	2,858
PE...2,4-D ^{iv}	a	H18...C72	2,903
	b	H24...O58	2,836
	c	H30...O63	2,859
	d	H31...O65	2,762
	e	H37...O62	2,990
PE...CLO ⁱ	a	H12...Cl58	2,959
	b	H31...O75	2,737
	c	H31...O76	2,921
PE...CLO ⁱⁱ	a	H19...O75	2,913
	b	H25...C56	2,983
	c	H27...N60	2,787
	d	H31...C54	2,850

	e	H31...N64	2,895
PE...CLOⁱⁱⁱ	a	H30...O75	2,432
	b	H30...O76	2,852
	c	H37...C68	2,884
PE...TMXⁱ,	a	H42...N78	2,987
	b	H36...C76	2,943
	c	H36...C72	2,894
	d	H73...C35	2,933
	e	H31...N69	2,766
	f	H31...O71	2,767
	g	H25...O70	2,799
PE...TMXⁱⁱ	a	H12...O71	2,889
	b	H18...O71	2,786
	c	H31...Cl81	2,977
	d	H32...Cl81	2,920
PE...TMXⁱⁱⁱ	a	H49...O70	2,607
	b	H49...N69	2,940
	c	H49...O71	2,931
	d	H39...C72	2,785
	e	H33...C75	2,970
	f	H31...C79	2,890
PE...TMX^{iv},	a	H18...C79	2,917
	b	H25...C72	2,915
	c	H30...N69	2,858
	d	H36...O71	2,731
	e	H36...O70	2,703

Fonte: Autor, 2026.

Na Figura 5(a), 5(b) e 5(c) estão representadas respectivamente as possíveis interações do adsorvente PE com os agrotóxicos 2,4-D, CLO e TMX. Os resultados das distâncias de interação estão descritos na Tabela 4. Os comprimentos de ligação dos complexos variaram de 2,514 Å a 3,00 Å.

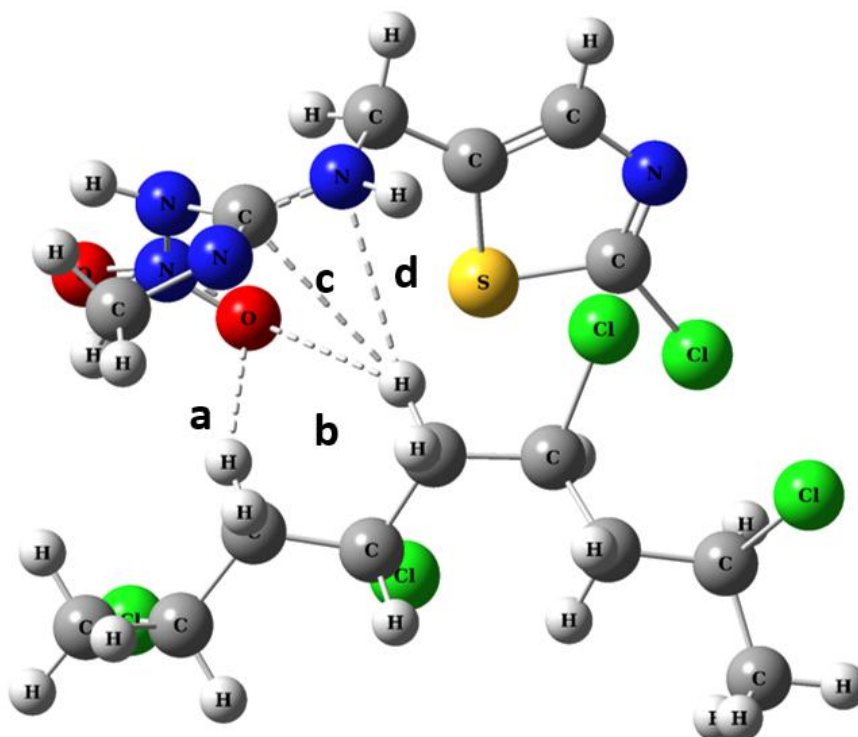
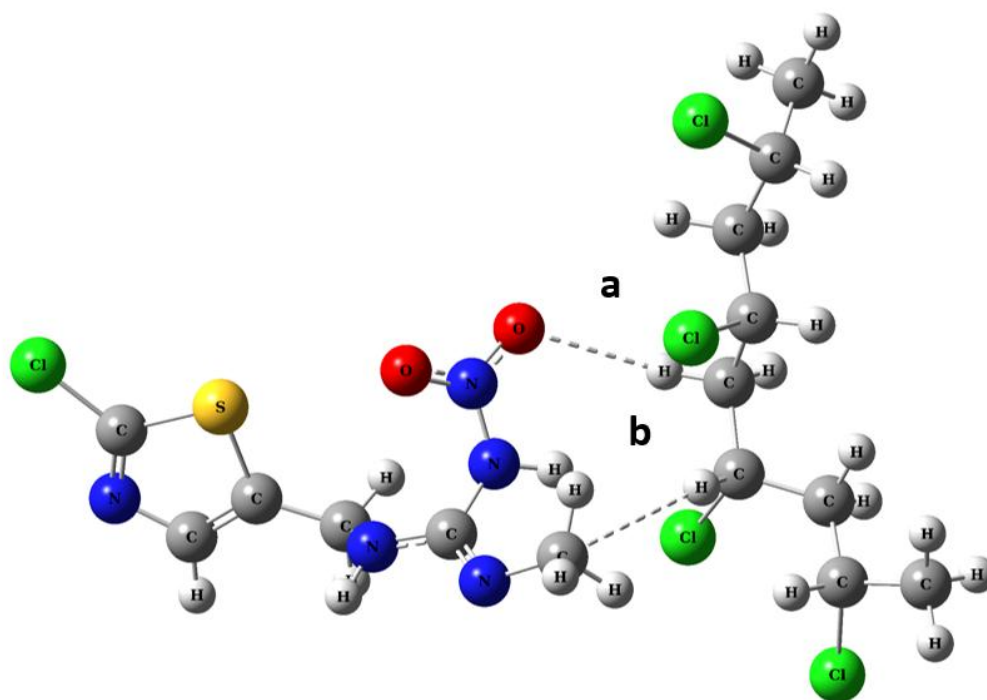
Figura 5(a). Representações estruturais do adsorvente PVC para o 2,4-Dⁱ.

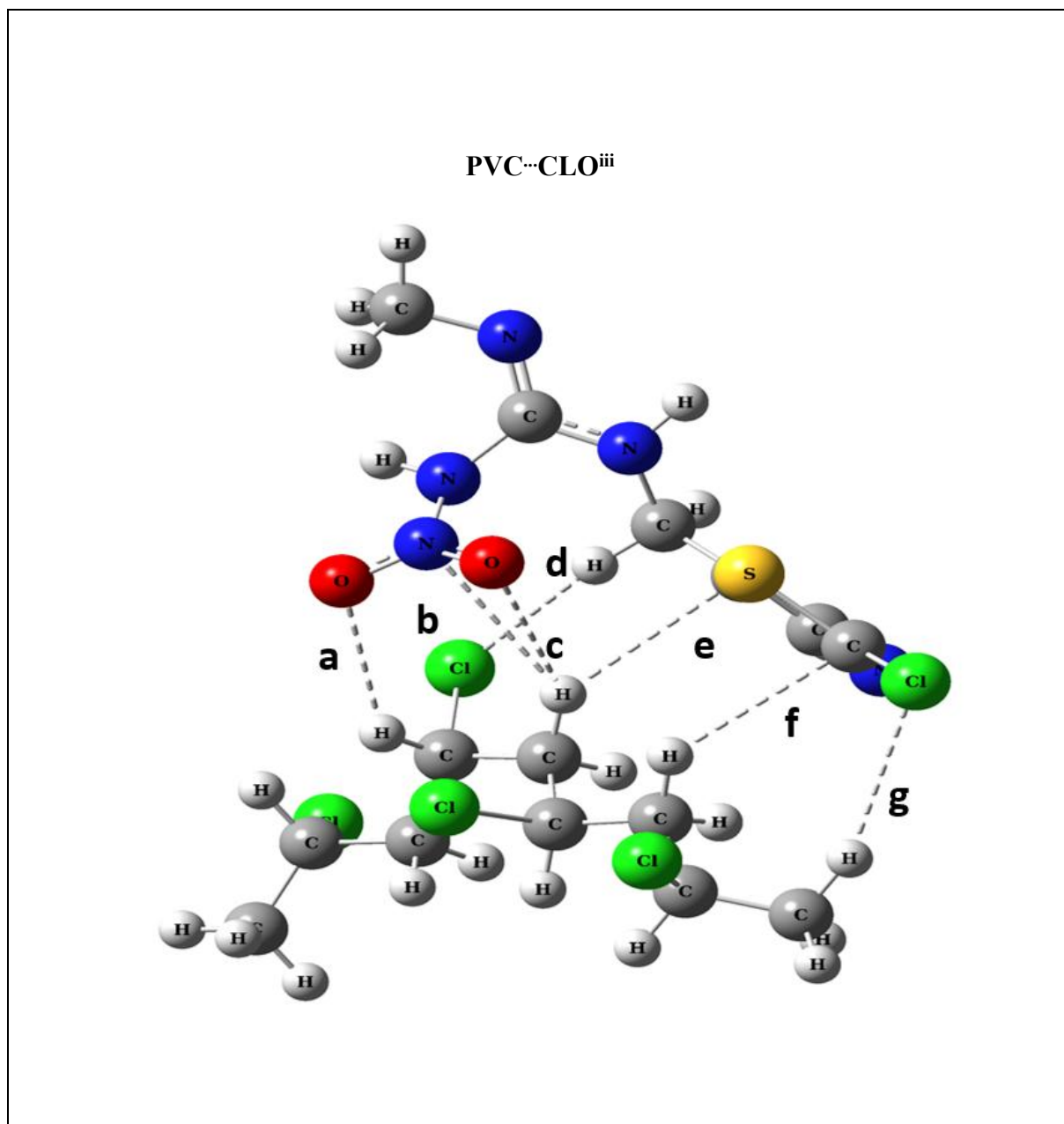


Fonte: Autor, 2026.

Os resultados para o complexo PVC...2,4-D, demonstraram um complexo estável com distância de 2,651 Å nos átomos C44...H10 e 2,944 Å nos átomos H34...Cl27.

Figura 5(b). Representações estruturais do adsorvente PVC para PVC...CLOⁱ, PVC...CLOⁱⁱ, PVC...CLOⁱⁱⁱ.

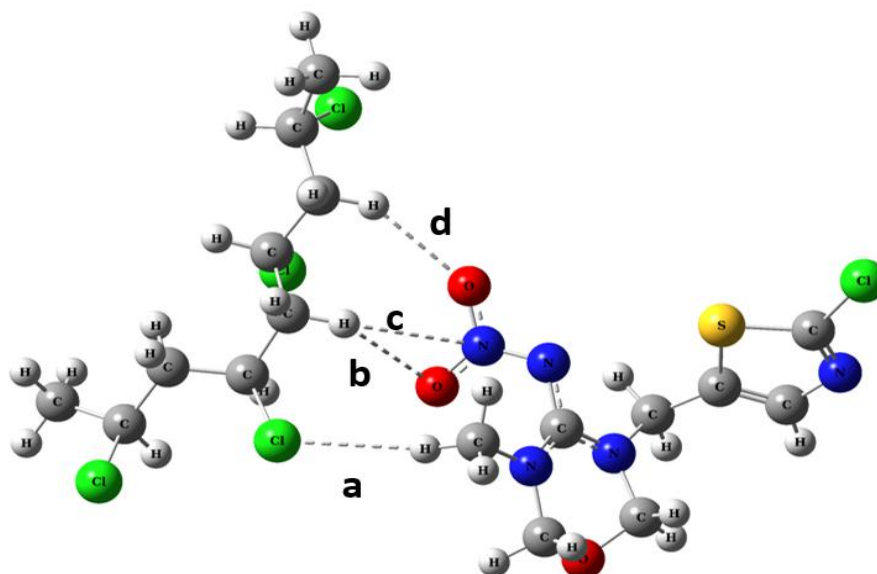
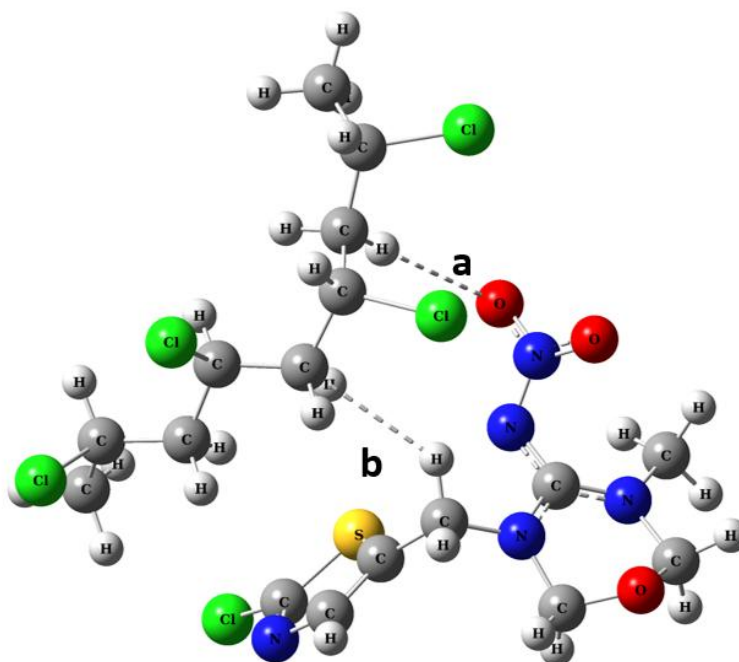
PVC...CLOⁱPVC...CLOⁱⁱ

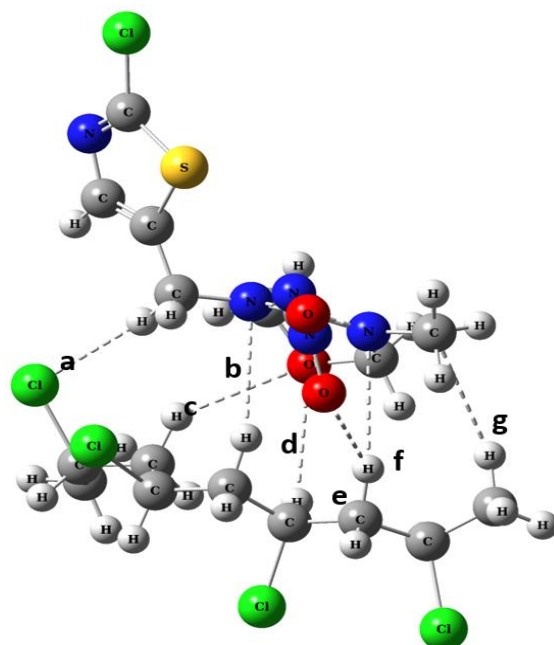
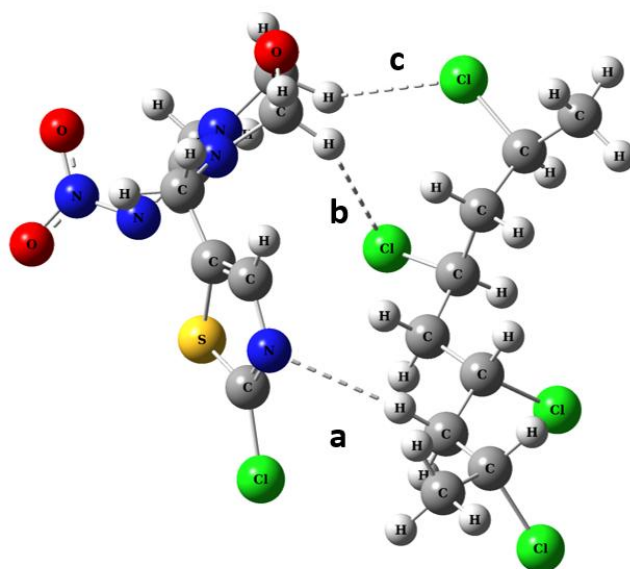


Fonte: Autor, 2026.

O sistema PVC...CLO resultou em três complexos estáveis, os menores comprimentos em PVC...Clⁱⁱ, com distância de 2,514 Å nos átomos O52...H12 e 2,824 Å nos átomos C44...H10.

Figura 5(c). Representações estruturais do adsorvente PVC para PVC...TMXⁱ, PVC...TMXⁱⁱ, PVC...TMXⁱⁱⁱ e PVC...TMXⁱⁱⁱ.

PVC...TMXⁱPVC...TMXⁱⁱ.

PVC...TMXⁱⁱⁱPVC...TMX^{iv}

Fonte: Autor, 2026.

O sistema PVC...TMX foram encontrados 4 complexos estáveis, sendo o PVC...TMXⁱ, com distância de 2,518 Å nos átomos H17...O47, 2,640 Å nos átomos H12...O46, 2,821 Å nos átomos Cl26...H42 e 2,910 Å nos átomos N45...H12 e o PVC...TMXⁱⁱ, com 2,564 Å nos átomos O47...H7 e 2,798 Å nos átomos C11...H49 com os menores comprimentos de ligação. Os outros valores intermediários estão descritos na tabela 4.

Tabela 4. Análise estrutural das interações para os complexos formados entre o PVC e contaminantes.

Sistemas	Interações	Átomos	Distância (Å)
PVC...2,4 – Dⁱ	a	H34...Cl27	2,944
	b	H10...C30	2,722
	c	H10...C44	2,651
	d	H5...C46	2,811
	e	H5...C31	2,810
PVC...CLOⁱ	a	H17...O51	2,523
	b	H12...O51	3,00
	c	H12...C42	2,925
	d	H12...N40	2,740
PVC...CLOⁱⁱ	a	H12...O52	2,514
	b	H10...C44	2,824
PVC...CLOⁱⁱⁱ	a	H10...O52	2,654
	b	H12...N50	2,996
	c	H12...O51	2,705
	d	H38...Cl26	2,828
	e	H12...C31	2,949
	f	H17...C32	2,905
	g	H22...Cl34	2,931
PVC...TMXⁱ,	a	H42...Cl26	2,821
	b	H12...O46	2,640
	c	H12...N45	2,910

	d	H17...O47	2,518
PVC...TMX ⁱⁱ	a	H7...O47	2,564
	b	H49...C11	2,798
PVC...TMX ⁱⁱⁱ	a	H50...Cl25	2.877
	b	H13...N38	2,973
	c	H7...O37	2,710
	d	H15...O37	2,951
	e	H18...N39	2,934
	f	H18...O46	2,577
	g	H24...C40	2,970
PVC...TMX ^{iv} ,	a	H18...N54	2,669
	b	H32...Cl26	2,773
	c	H35...Cl25	2,877

Fonte: Autor, 2026.

5.4 Energia de Interação eletrônica, Gibbs e Entalpia

Para entender a termodinâmica da formação dos complexos, entre os pesticidas e os MPs puros, a energia de ligação (ΔE_{Bind}), energia de Gibbs (ΔG) e a entalpia (ΔH) após as interações entre o adsorvente e adsorvato foram analisadas e descritas na Tabela 5. A energia de ligação, indica a força da adsorção, a entalpia, fornece o valor do calor liberado ou absorvido durante a adsorção e a energia de Gibbs determina a espontaneidade do processo de adsorção. Com esses parâmetros foi possível prever a viabilidade, avaliar a magnitude das interações e a estabilidade da formação dos complexos (Bihain et al., 2025).

Tabela 5. Energia de interação (ΔE_{Bind}), energia de Gibb (ΔG) e Entalpia (ΔH) para os complexos estudados.

Complexos	ΔE_{Bind} (kcal.mol ⁻¹)	ΔH (kcal.mol ⁻¹)	ΔG (kcal.mol ⁻¹)
2,4-D			
2,4-D...PE ⁱ	-9,72	-9,26	3,33
2,4-D...PE ⁱⁱ	-3,88	-3,46	8,33
2,4-D...PE ⁱⁱⁱ	-9,79	-9,33	3,40
2,4-D...PE ^{iv}	-9,73	-9,39	3,72
2,4-D...PVC ⁱ	-9,12	-8,50	3,39
CLO			
CLO...PE ⁱ	-4,31	-3,90	9,20
CLO...PE ⁱⁱ	-9,52	-9,44	5,01
CLO...PE ⁱⁱⁱ	-6,41	-6,23	8,20
CLO...PVC ⁱ	-9,99	-9,33	2,54
CLO...PVC ⁱⁱ	-5,59	-4,87	6,32
CLO...PVC ⁱⁱⁱ	-8,53	-7,68	3,35
TMX			
TMX...PE ⁱ	-8,60	-8,19	5,22
TMX...PE ⁱⁱ	-5,57	-5,17	8,31
TMX...PE ⁱⁱⁱ	-8,41	-8,34	6,94
TMX...PVC ⁱ	-3,45	-2,74	8,62
TMX...PVC ⁱⁱ	-9,02	-8,42	3,67
TMX...PVC ⁱⁱⁱ	-7,89	-7,14	4,60

Fonte: Autor, 2026.

Analisando os resultados das propriedades termodinâmicas da Tabela 5, para o parâmetro ΔE_{Bind} , todos os valores são negativos (< 0 kcal/mol) e segundo Jang et al. (2024) valores negativos significam que as interações entre os MPs e os pesticidas são termodinamicamente favoráveis. Os valores de ΔH , são todos negativos, indicando que as interações são exotérmicas, e favorecida em baixa temperatura, e não espontâneas, uma vez que todos os ΔG , encontrados estão positivos (> 0 kcal mol⁻¹), portanto, para que essa adsorção ocorra, segundo Bihain et al. (2025) outros fatores como temperatura, pressão, força iônica,

concentração dos reagentes, acoplamento e pH devem influenciar. No ambiente natural, os MPs sofrem envelhecimento e formação do biofilme, que podem alterar seu comportamento de adsorção/dessorção (Leng et al., 2025). Ji et al., (2024) descreveu que as capacidades de adsorção de tetraciclina e cefalexina nas partículas do PE aumentaram na ordem PE puro < PE envelhecido < PE com biofilme < PE envelhecido e com biofilme. No estudo de Sousa et al. (2024, 2025), MPs de PE não envelhecidos induziram efeitos subletais em *Girardia tigrina*, enquanto o envelhecimento químico e fotoquímico favoreceu a adsorção do herbicida 2,4-D. A exposição à combinação MP-PE envelhecido + 2,4-D, resultou em efeitos ecotoxicológicos mais intensos, com alterações comportamentais, atrasos regenerativos e redução reprodutiva. Esses resultados demonstram que a interação entre MPs e pesticidas ocorre após o envelhecimento do MP-PE. A tetraciclina no estudo de Fu et al. (2025) exibiu maior capacidade de adsorção no PVC após o envelhecimento UV devido a alteração significativa das características superficiais, formação de grupos funcionais com adição de oxigênio, criando novo sítios de adsorção.

5.5 Interações não covalentes (NCIs)

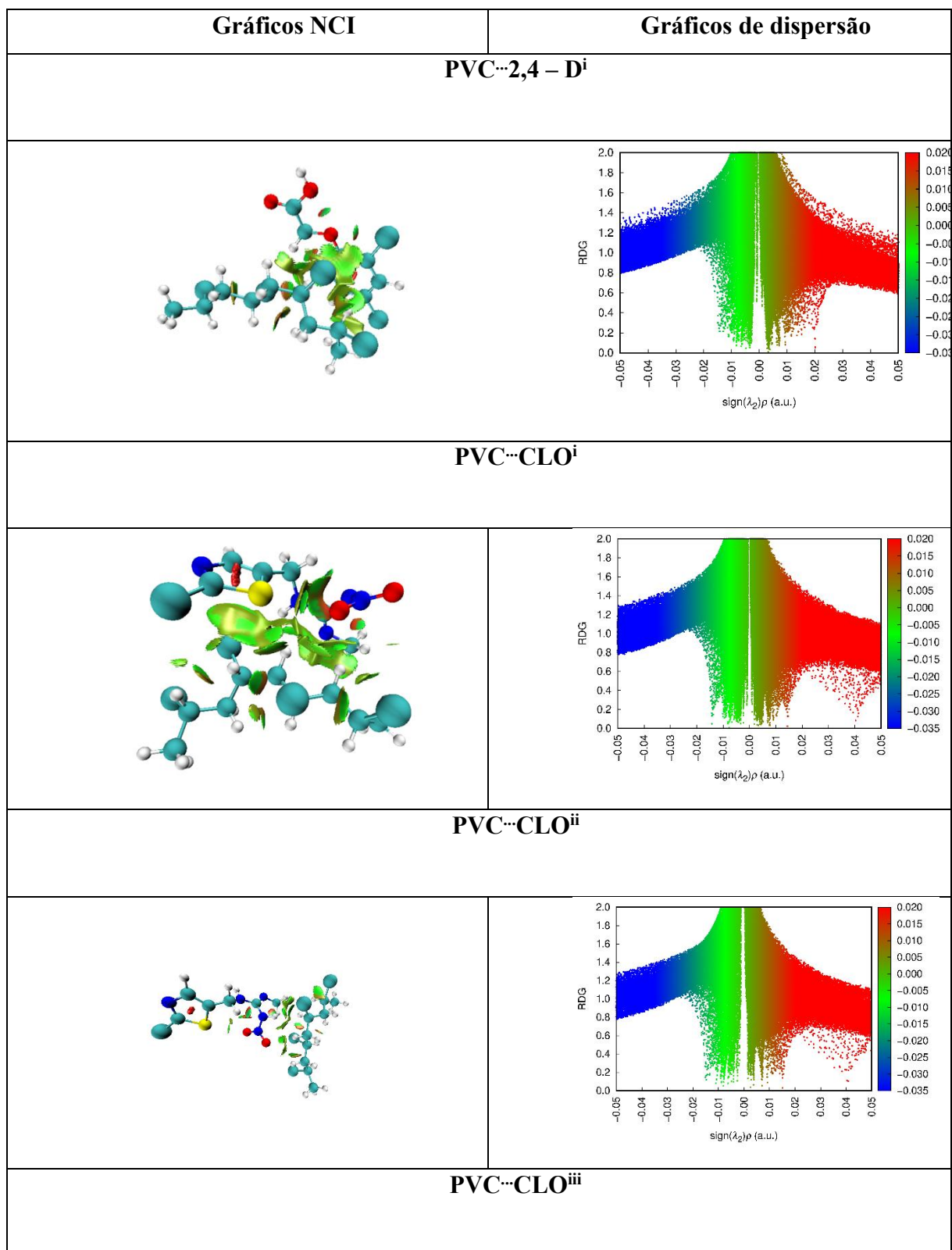
A química computacional oferece uma ferramenta computacional relevante para identificar e visualizar as complexas Interações Não Covalentes (NCIs) e é baseada na abordagem RDG (*Reduced Density Gradient*), uma função matemática adimensional que combina densidade eletrônica ($\rho(r)$) e seu gradiente ($\nabla\rho(r)$) para mapear as NCIs em sistemas moleculares (Lee; Lee; Kim, 2025). Sua fórmula é dada pela Equação 4.

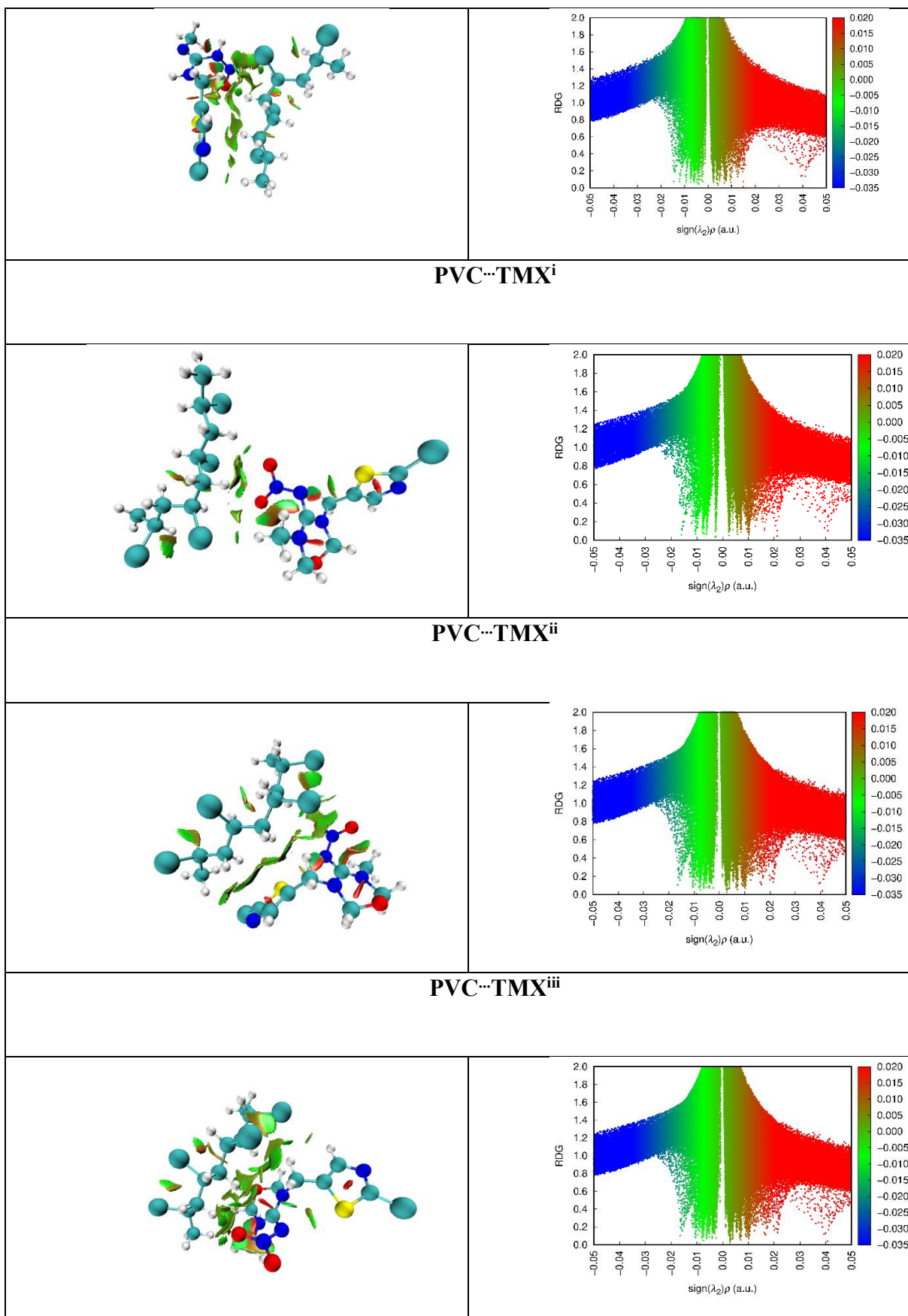
O parâmetro $sign(\lambda_2)\rho$ classifica as interações não covalentes em: (i) na cor azul, $sign(\lambda_2)\rho \ll 0$, interações atrativas fortes (ligação de hidrogênio, dipolo-dipolo); (ii) na cor verde, $sign(\lambda_2)\rho \approx 0$, interações de van der Waals (vdW); (iii) na cor vermelha, $sign(\lambda_2)\rho \gg 0$, repulsões estéricas (Lee; Lee; Kim, 2025; Lee et al., 2025).

As Figuras 6 (a) e 6(b) apresentam os gráficos NCIs, de todos os sistemas analisados, caracterizados por isosuperfícies coloridas e gráficos de dispersão do RDG *versus* a função $sign((\lambda_2)\rho)$, as interações não covalentes são caracterizadas por picos pontilhados para baixo (Devi et al., 2025). Em ambos os gráficos, a intensidade das interações pode ser reconhecida pelos códigos de cores.

Conforme mostrado na Figura 6, a análise NCI em diferentes geometrias otimizadas, revelou padrões distintos de interações. O PVC, apresentou interações mais eficientes, com valores dos picos RDG $sign(\lambda_2)\rho \ll 0$.

Figura 6 (a). Gráficos de isosuperfícies NCIs 3D (esquerda) e gráficos 2D (direita) RDG versus $\text{sign}(\lambda_2)\rho$ para o PVC e os pesticidas.

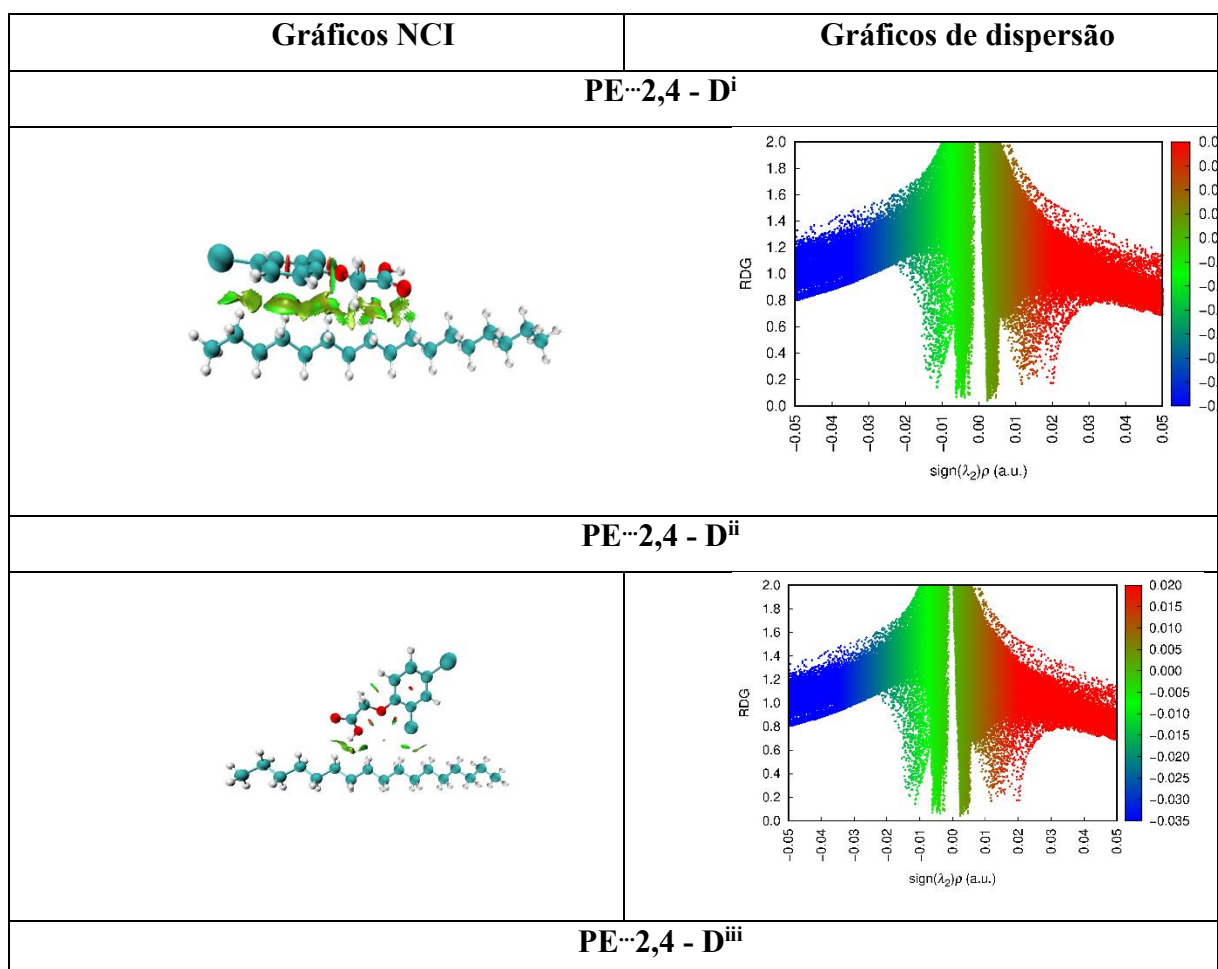


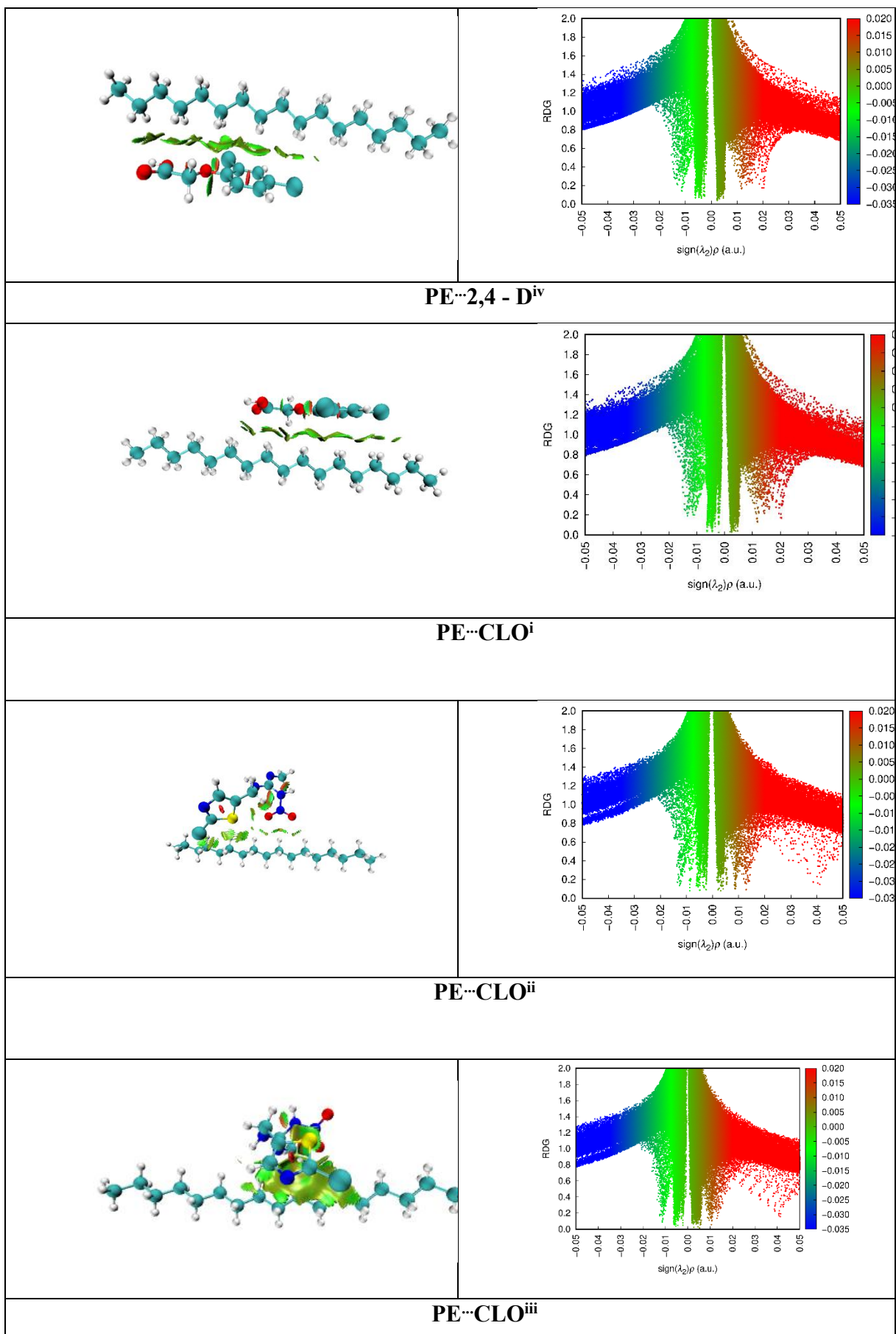


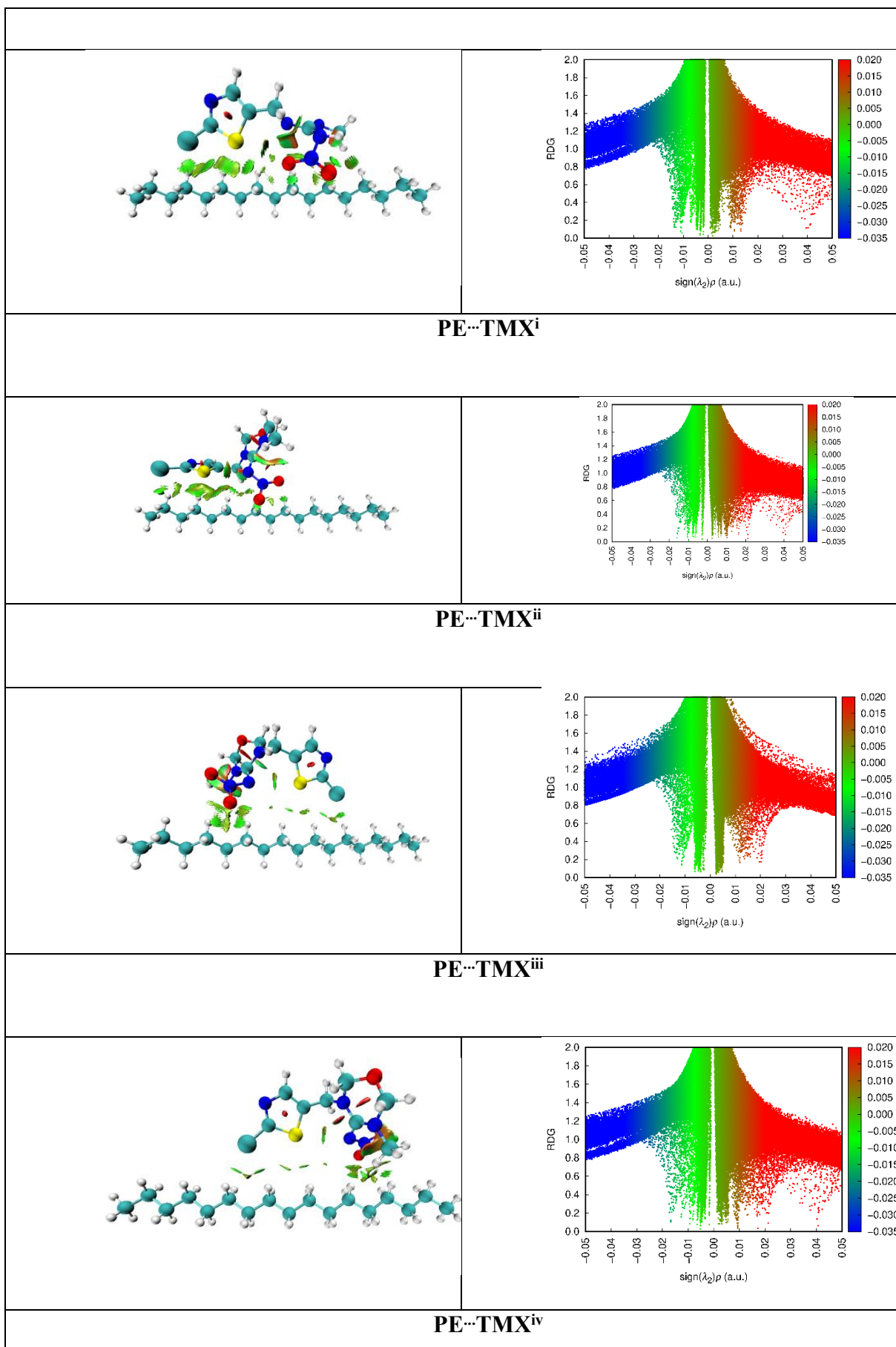
Fonte: Autor, 2026.

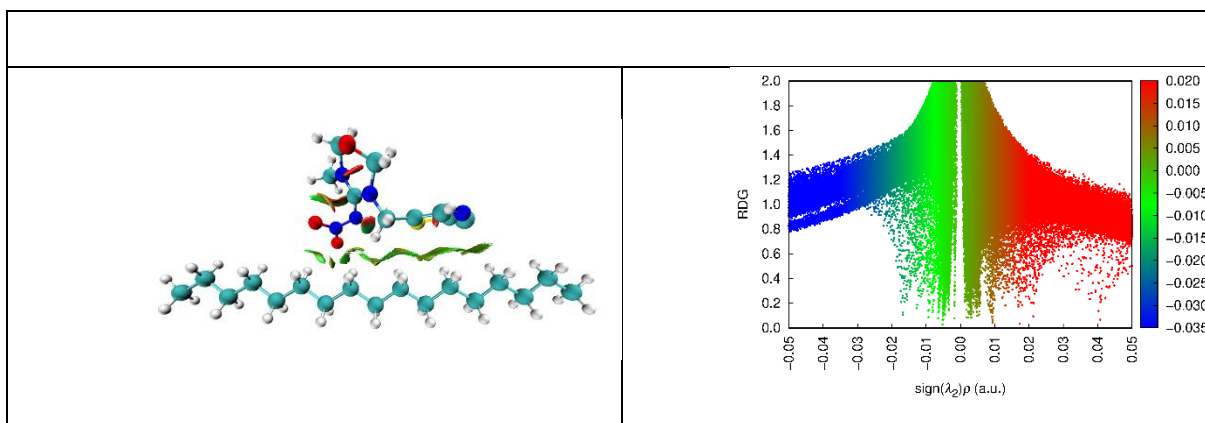
No complexo PVC...2,4-Dⁱⁱ, o grupo carbonila (- C=O) do 2,4-D e os átomos de hidrogênio da matriz adsortiva, apresentaram valores de $sign(\lambda_2)\rho < -0,03$ a.u. a $-0,02$ a.u. caracterizando ligações de hidrogênio. Adicionalmente, os complexos PVC...CLO (i) e (ii), apresentaram interações de vdW $sign(\lambda_2)\rho < -0,02$ a.u. a $0,00$ a.u., entre o anel piridínico da CLO e os átomos de cloro do PVC. Para TMX, repulsões estéricas em PVC...TMX (i) e (ii) foram mais pronunciadas, com valores de $sign(\lambda_2)\rho > 0,02$ a.u., os demais complexos (ii) e (iv) exibiram fracas interações de vdW com $sign(\lambda_2)\rho \approx -0,01$ a.u.

Figura 6 (b). Gráficos de isosuperfícies NCIs 3D (esquerda) e gráficos 2D (direita) RDG versus $sign(\lambda_2)\rho$ PE.









Fonte: Autor, 2026.

O PE devido a sua cadeia carbônica apolar exibiu predominantemente interações de van der Waals mais fracas $\text{sign}(\lambda_2)\rho \approx 0$, com picos RDG entre -0,01 a.u a 0,0 a.u. em todas geometrias otimizadas, demonstrando eficiência adsortiva menor nos complexos PE...contaminantes.

Polímeros como o PE apolares, exibem interações de VdW fracas com os contaminantes. No caso de polímeros polares como o PVC é possível observar fortes interações de VdW.

6 CONCLUSÃO

Este estudo demonstrou, através de cálculos DFT, que os MPs de PE e PVC apresentam capacidade distintas de adsorção aos pesticidas 2,4-D, TMX e CLO, com o PVC exibindo maior capacidade adsortiva devido às interações eletroestáticas e ligações de hidrogênio, enquanto o PE estabelece predominantemente interações fracas do tipo van der Waals. As análises termodinâmicas revelaram processos de adsorção exotérmicos ($\Delta H < 0$) porém não espontâneos ($\Delta G > 0$) sugerindo a dependência dos fatores ambientais para favorecer o processo de adsorção.

Os resultados evidenciam o potencial dos MPs como transportadores de pesticidas no ambiente, com implicações relevantes para a avaliação de riscos ambientais. A metodologia computacional utilizada foi essencial para caracterização molecular dos mecanismos de interação. Pesquisas futuras são essenciais para compreender a influência dos fatores ambientais e do envelhecimento dos materiais poliméricos no processo adsortivo observado.

REFEREÊNCIAS

- ADAMU, H. et al. Microplastics and Co-pollutants in soil and marine environments: Sorption and desorption dynamics in unveiling invisible danger and key to ecotoxicological risk assessment. **Chemosphere**, v. 362, p. 142630, 1 ago. 2024.
- AHMED, Z. K. A.; ERMIŞ, T.; ERMIŞ, E. Theoretical and experimental study on (E)-N'-(2-hydroxy-5-(thiophen-3-yl)benzylidene)benzohydrazide compound: Its optimization with DFT and Fuzzy logic approach (FLA), structural and spectroscopic investigation, HOMO-LUMO, MEP, atomic charge, and NBO analysis. **Journal of Molecular Structure**, v. 1315, p. 138829, 5 nov. 2024.
- ALIMNAZAROV, B. K. et al. Synthesis, Crystal structure, Hirshfeld surface, Thermal analysis and DFT Calculations of Zn(II) complex of mixed ligand from 2,4-dichlorophenoxy acid (2, 4-D) and ethylenediamine (en). **Chemical Data Collections**, v. 52, p. 101156, 1 ago. 2024.
- ASHOKKUMAR, V. et al. Microplastic pollution: Critical analysis of global hotspots and their impact on health and ecosystems. **Journal of Environmental Management**, v. 381, p. 124995, 1 maio 2025.
- ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DA INDÚSTRIA DO PLÁSTICO (ABIPLAST). Perfil ABIPLAST 2024: as indústrias de transformação e reciclagem de plástico no Brasil. São Paulo: **ABIPLAST**, 2024.
- ASSIS, G. C. et al. Microplastics as hazardous pollutants: Occurrence, effects, removal and mitigation by using plastic waste as adsorbents and supports for photocatalysts. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, v. 11, n. 6, p. 111107, 1 dez. 2023.
- AZEEM, I. et al. Uptake and Accumulation of Nano/Microplastics in Plants: A Critical Review. **Nanomaterials**, v. 11, n. 11, p. 2935, nov. 2021.
- BIHAIN, M. F. R. et al. Theoretical evaluation of 17 β -estradiol and 17 α -ethinyl estradiol adsorption on reduced graphene oxide: Interactions, bonds, and energies. **Computational and Theoretical Chemistry**, v. 1244, p. 115087, 1 fev. 2025.
- BOSKER, T. et al. Microplastics accumulate on pores in seed capsule and delay germination and root growth of the terrestrial vascular plant *Lepidium sativum*. **Chemosphere**, v. 226, p. 774–781, jul. 2019.
- BOTTERELL, Z. L. R. et al. Microplastic ingestion in zooplankton from the Fram Strait in the Arctic. **Science of The Total Environment**, v. 831, p. 154886, 20 jul. 2022.
- BOUGHATTAS, I. et al. A coexposição ao microplástico ambiental e ao pesticida ácido 2,4-diclorofenoxiacético (2,4-D) induz alterações distintas no metaboloma e na estrutura da comunidade microbiana no intestino da minhoca *Eisenia andrei*. **Environmental Pollution**, v. 344, p. 123213, 1 mar. 2024.

CAMPISI, L.; LA MOTTA, C.; NAPIERSKA, D. Polyvinyl chloride (PVC), its additives, microplastic and human health: Unresolved and emerging issues. **Science of The Total Environment**, v. 960, p. 178276, 15 jan. 2025.

CASTRO, G. B. et al. The silent harm of polyethylene microplastics: Invertebrates growth inhibition as a warning of the microplastic pollution in continental waters. **Limnologia**, v. 93, p. 125964, 1 mar. 2022.

CHAI, J. D.; HEAD-GORDON, M. Long-range corrected hybrid density functionals with damped atom–atom dispersion corrections. **Physical Chemistry Chemical Physics**, v. 10, n. 44, p. 6615–6620, 28 nov. 2008.

CHANG, J. A critical review on interaction of microplastics with organic contaminants in soil and their ecological risks on soil organisms. **Chemosphere**, v. 306, p. 135573, 1 nov. 2022.

CHATTERJEE, S. et al. Exploration of supramolecular interactions, Hirshfeld surface, FMO, molecular electrostatic potential (MEP) analyses of pyrazole based Zn(II) complex. **Journal of the Indian Chemical Society**, v. 101, n. 10, p. 101275, 1 out. 2024.

COLZI, I. et al. Impact of microplastics on growth, photosynthesis and essential elements in *Cucurbita pepo* L. **Journal of Hazardous Materials**, v. 423, p. 127238, fev. 2022.

COSTA, M. B. et al. Microplastic atmospheric pollution in an urban Southern Brazil region: What can spider webs tell us? **Journal of Hazardous Materials**, v. 477, p. 135190, 15 set. 2024

CRAWFORD, C. B.; QUINN, B. 8 - Microplastic collection techniques. In: CRAWFORD, C. B.; QUINN, B. (Orgs.). *Microplastic Pollutants*. [S.l.]: Elsevier, 2017. p. 179–202

DAGDELEN, U.; TURKYILMAZ, D.; ESENBUGA, N. Describing the Accumulation, Concentration, and Amplification Effects of MPs Through the Food Chain. **Current Nutrition & Food Science**, v. 21, n. 4, p. 430–440, mar. 2025.

DE CARVALHO, R. F. et al. Theoretical and Experimental Study of the Stability of Thiamethoxam Under Different Environmental Conditions. **Processes**, v. 12, n. 11, p. 2328, 23 out. 2024.

DE OLIVEIRA, I. M. et al. Efeitos dos neonicotinoides tiametoxam e clotianidina na liberação de dopamina in vivo no estriado de ratos. **Toxicology Letters**, v. 192, n. 3, p. 294–297, 15 fev. 2010.

DE SOUZA, B. B.; MEEGODA, J. Insights into PFAS environmental fate through computational chemistry: A review. **Science of The Total Environment**, v. 926, p. 171738, 20 maio 2024.

DENNINGTON, R.; KEITH, T.; MILLAM, J. GaussView, versão 6.1 [software]. Wallingford: **Gaussian Inc.**, 2019.

DEVI, L. et al. Synthesis, spectral, structural and quantum chemical computational analyses of ethyl 2-((3-cyanopyridin-2-yl)amino)cyclopent-1-ene-1-carboxylate. **Journal of Molecular Structure**, v. 1343, p. 142840, 25 out. 2025.

DING, P. et al. Synergistic neurotoxicity of clothianidin and photoaged microplastics in zebrafish: Implications for neuroendocrine disruption. **Environmental Pollution**, v. 368, p. 125797, 1 mar. 2025.

DOHNAL, V. New QSPR molecular descriptors based on low-cost quantum chemistry computations using DFT/COSMO approach. **Journal of Molecular Liquids**, v. 407, p. 125256, 1 ago. 2024.

DOS SANTOS SILVA, J. et al. Microplastic pollution in the Amazon Basin: Current scenario, advances and perspectives. **Science of The Total Environment**, v. 946, p. 174150, 10 out. 2024.

ESPINOSA, C.; ESTEBAN, M. Á.; CUESTA, A. A administração dietética de microplásticos de PVC e PE produz danos histológicos, estresse oxidativo e imunorregulação em robalo europeu (*Dicentrarchus labrax* L.). **Fish & Shellfish Immunology**, v. 95, p. 574–583, 1 dez. 2019.

FANG, S. et al. Combined pollution of soil by heavy metals, microplastics, and pesticides: Mechanisms and anthropogenic drivers. **Journal of Hazardous Materials**, v. 485, p. 136812, mar. 2025.

FEISAL, N. A. S. et al. The potential of using microalgae for microplastic degradation in aquatic ecosystem. **Algal Research**, v. 85, p. 103825, 1 jan. 2025.

FU, L. et al. Adsorption behavior of organic pollutants on microplastics. **Ecotoxicology and Environmental Safety**, v. 217, p. 112207, 1 jul. 2021.

FU, S. et al. Comparison of tetracycline adsorption on UV-aged degradable and non-degradable microplastics. **Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects**, v. 718, p. 136949, 5 ago. 2025.

GAAIED, S. et al. Gene expression patterns and related enzymatic activities of detoxification and oxidative stress systems in zebrafish larvae exposed to the 2,4-dichlorophenoxyacetic acid herbicide. **Chemosphere**, v. 224, p. 289–297, 1 jun. 2019.

GEUEKE, B. et al. Systematic evidence on migrating and extractable food contact chemicals: Most chemicals detected in food contact materials are not listed for use. **Critical Reviews in Food Science and Nutrition**, v. 63, n. 28, p. 9425–9435, 6 nov. 2023.

HA, T. J. et al. Microplásticos como adsorventes para Pb 2+ e Cd 2+ : Um estudo comparativo entre polipropileno, cloreto de polivinila, polietileno de alta densidade e polietileno de baixa densidade. **Journal of Contaminant Hydrology**, v. 269, p. 104491, 1 fev. 2025.

HE, P. et al. Association of microplastics in human cerebrospinal fluid with Alzheimer's disease-related changes. **Journal of Hazardous Materials**, v. 494, p. 138748, 15 ago. 2025.
HOHN, S. et al. The long-term legacy of plastic mass production. **Science of The Total Environment**, v. 746, p. 141115, 1 dez. 2020.

HU, M. et al. Insight into the effect of microplastics on the adsorption and degradation behavior of thiamethoxam in agricultural soils. **Chemosphere**, v. 337, p. 139262, 1 out. 2023.

HUANG, S. et al. Polyethylene and polyvinyl chloride microplastics promote soil nitrification and alter the composition of key nitrogen functional bacterial groups. **Journal of Hazardous Materials**, v. 453, p. 131391, 5 jul. 2023.

HUERTA LWANGA, E. et al. Field evidence for transfer of plastic debris along a terrestrial food chain. **Scientific Reports**, v. 7, n. 1, p. 14071, 26 out. 2017.

HUMPHREY, W.; DALKE, A.; SCHULTEN, K. VMD: Visual molecular dynamics. **Journal of Molecular Graphics**, v. 14, n. 1, p. 33–38, 1 fev. 1996.

IBRAHIM, Y. S. et al. Detection of microplastics in human colectomy specimens. **JGH open: an open access journal of gastroenterology and hepatology**, v. 5, n. 1, p. 116–121, jan. 2021.

ISLAM, T.; CHENG, H. Existence and fate of microplastics in terrestrial environment: A global fretfulness and abatement strategies. **Science of The Total Environment**, v. 953, p. 176163, 25 nov. 2024.

JAIKUMAR, I. M. et al. A comprehensive review of microplastic pollution in freshwater and marine environments. **Green Analytical Chemistry**, v. 12, p. 100202, mar. 2025.

JANG, M. H. et al. Elucidating adsorption mechanisms of benzalkonium chlorides (BACs) on polypropylene and polyethylene terephthalate microplastics (MPs): Effects of BACs alkyl chain length and MPs characteristics. **Journal of Hazardous Materials**, v. 468, p. 133765, 15 abr. 2024.

JL, H. et al. Adsorption of antibiotics on microplastics (MPs) in aqueous environments: The impacts of aging and biofilms. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, v. 12, n. 2, p. 111992, 1 abr. 2024.

JIANG, X. et al. Ecotoxicity and genotoxicity of polystyrene microplastics on higher plant *Vicia faba*. **Environmental Pollution**, v. 250, p. 831–838, jul. 2019.

JIANG, Z. et al. Contrasting effects of microplastic aging upon the adsorption of sulfonamides and its mechanism. **Chemical Engineering Journal**, v. 430, p. 132939, fev. 2022.

JUNG, J. et al. Inhibitory effects of microplastics on the oxidative degradation of phenanthrene during advanced oxidation processes: A kinetic and DFT study. **Journal of Hazardous Materials**, v. 494, p. 138574, 15 ago. 2025.

KISNARTI, E. A. et al. Dispersion of surface floating plastic marine debris from Indonesian waters using hydrodynamic and trajectory models. **Marine Pollution Bulletin**, v. 198, p. 115779, 1 jan. 2024.

LANDERA, A. et al. Experimental and computational study of polystyrene sulfonate breakdown by a Fenton reaction. **Polymer Degradation and Stability**, v. 215, p. 110451, 1 set. 2023.

LEBRETON, L.; ANDRADY, A. Future scenarios of global plastic waste generation and disposal. **Palgrave Communications**, v. 5, n. 1, p. 1–11, 29 jan. 2019.

LEE, S. et al. Efeitos do cloreto de polivinila e dos microplásticos de polietileno de baixa densidade no estresse oxidativo e na função mitocondrial da minhoca (*Eisenia fetida*). **Ecotoxicology and Environmental Safety**, v. 283, p. 116847, 15 set. 2024.

LEE, S.; LEE, J. J.; KIM, C. Selective fluorescent and colorimetric staining of polyurethane microplastics by using a solvatochromic-based dye applicable to environmental samples: Experimental and theoretical implication to adsorption mechanism. **Applied Surface Science**, v. 685, p. 162044, 15 mar. 2025.

LEE, Y. S. et al. A cost-effective and efficient fluorescence staining agent for the identification of microplastics in environmental samples and zebrafish (*Danio rerio*). **Journal of Hazardous Materials**, v. 493, p. 138365, 5 ago. 2025.

LENG, Y. et al. Adsorption of methyl parathion on four various microplastics in aqueous solution: Kinetics, isotherms and molecular dynamics simulations. **Gondwana Research**, v. 144, p. 33–48, 1 ago. 2025.

LESLIE, H. A. et al. Discovery and quantification of plastic particle pollution in human blood. **Environment International**, v. 163, p. 107199, 1 maio 2022.

LI, S. et al. Combined exposure of polystyrene microplastics and benzo[a]pyrene in rat: Study of the oxidative stress effects in the liver. **Ecotoxicology and Environmental Safety**, v. 278, p. 116390, 15 jun. 2024a.

LI, T. et al. A review of the influence of environmental pollutants (microplastics, pesticides, antibiotics, air pollutants, viruses, bacteria) on animal viruses. **Journal of Hazardous Materials**, v. 468, p. 133831, 15 abr. 2024b.

LI, X. et al. Thiamethoxam at environmentally relevant concentrations induces neurotoxicity in zebrafish larvae through binding with multiple receptors. **Eco-Environment & Health**, v. 4, n. 1, p. 100133, 1 mar. 2025.

LIU, S. et al. Neonicotinoid and bisamide insecticides in wild freshwater fish from the Wanquan River, Hainan, China: Factors affecting tissue distribution and a risk assessment. **Environmental Pollution**, v. 372, p. 126053, 1 maio 2025.

LU, C. et al. Toxicity comparison of multiple biodegradable and conventional microplastics on earthworms: Ingestion, tissue damage, oxidative stress, and transcriptional responses. **Ecotoxicology and Environmental Safety**, v. 307, p. 119415, 15 nov. 2025.

LU, T.; CHEN, F. Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer. **Journal of Computational Chemistry**, v. 33, n. 5, p. 580–592, 2012.

LUO, Z. et al. Riscos ecológicos sob poluição combinada: efeitos toxicológicos da clotianidina e microplásticos em *Penaeus vannamei*. **Aquatic Toxicology**, v. 285, p. 107417, 1 ago. 2025.

MALLOUM, A. et al. Computational methods for adsorption study in wastewater treatment. **Journal of Molecular Liquids**, v. 390, p. 123008, 15 nov. 2023.

MATUSINHO, I. A. S. et al. Influence of starch source on properties of blends based on thermoplastic starch and poly(butylene-adipate-co-terephthalate). **Carbohydrate Polymer Technologies and Applications**, v. 7, p. 100433, 1 jun. 2024.

MO, Q. et al. Adsorption mechanism of two pesticides on polyethylene and polypropylene microplastics: DFT calculations and particle size effects. **Environmental Pollution**, v. 291, p. 118120, 15 dez. 2021.

MOL, G. P. S.; ARULDHAS, D.; JOE, I. H. Chemical reactivity, molecular electrostatic potential and in-silico analysis on benzimidazole fungicide benomyl. **Heliyon**, v. 8, n. 11, p. e11417, 1 nov. 2022.

MORGON, N. H.; COUTINHO, K. R. Métodos de química teórica e modelagem molecular. São Paulo: **Livraria da Física**, 2007.

MUHIB, M. I. et al. Occurrence of microplastics in tap and bottled water, and food packaging: A narrative review on current knowledge. **Science of The Total Environment**, v. 865, p. 161274, 20 mar. 2023.

NEI, N. et al. Impacto do microplástico de cloreto de polivinila (PVC) no crescimento, fotossíntese e absorção de nutrientes de *Solanum lycopersicum* L. (Tomate). **Environmental Pollution**, v. 349, p. 123994, 15 maio 2024.

O'BRIEN, S. et al. There's something in the air: A review of sources, prevalence and behaviour of microplastics in the atmosphere. **Science of The Total Environment**, v. 874, p. 162193, 20 maio 2023.

PETERSSON, G. A. et al. A complete basis set model chemistry. I. The total energies of closed-shell atoms and hydrides of the first-row elements. **The Journal of Chemical Physics**, v. 89, n. 4, p. 2193–2218, 15 ago. 1988.

POLIDO, L. R. F. et al. Effects of 2,4-dichlorophenoxyacetic acid (2,4-D), isolated and in a formulated product, on the functional parameters of isolated rat liver mitochondria. **Toxicology in Vitro**, v. 104, p. 105984, 1 abr. 2025.

RAFA, N. et al. Microplastics as carriers of toxic pollutants: Source, transport, and toxicological effects. **Environmental Pollution**, v. 343, p. 123190, fev. 2024.

RAGU PRASATH, A.; SUDHAKAR, C.; SELVAM, K. Microplastics in the environment: Types, sources, and impact on human and aquatic systems. **Bioresource Technology Reports**, v. 29, p. 102055, 1 fev. 2025.

RODRIGUES, C. C. et al. How do microplastics alter molluscicidal activity? Effects of weathered microplastics and niclosamide in developing freshwater snails. **Science of The Total Environment**, v. 922, p. 171165, 20 abr. 2024.

SANTANA, G. B. et al. Photoaging effects on polyethylene microplastics: Structural changes and chlorpyrifos adsorption. **Marine Environmental Research**, v. 203, p. 106844, 1 jan. 2025.

SHI, W. et al. A global review on the abundance and threats of microplastics in soils to terrestrial ecosystem and human health. **Science of The Total Environment**, v. 912, p. 169469, 20 fev. 2024.

SILVA, S. B. et al. Individual and combined effects of commercial glyphosate, atrazine and 2,4-D herbicides on the gerbil ventral prostate. **Chemosphere**, v. 367, p. 143626, 1 nov. 2024.

SIREGAR, P. et al. Avaliação da toxicidade de neonicotinoides para comportamentos de minhocas (*Eisenia fetida*) por meio de um novo ensaio de rastreamento de locomoção. **Environmental Pollution**, v. 351, p. 124111, 15 jun. 2024.

SONG, D.; YAO, Q. Exploring the molecular mechanisms of herbicide adsorption on microplastics: A quantum chemical approach. **Science of The Total Environment**, v. 974, p. 179173, 25 abr. 2025.

SOUSA, R. R. et al. Behavioral and physiological responses of *Girardia tigrina* exposed to polyethylene microplastics. **Environmental Science and Pollution Research**, v. 31, n. 33, p. 46052–46060, 9 jul. 2024.

SOUSA, R. R. et al. Interaction between polyethylene microplastic and 2,4-dichlorophenoxyacetic acid (2,4-D): chemical and ecotoxicological evaluation with *Girardia tigrina*. **Discover Toxicology**, v. 2, n. 1, p. 18, 23 set. 2025.

STEVENS, W. J. et al. Relativistic compact effective potentials and efficient, shared-exponent basis sets for the third-, fourth-, and fifth-row atoms. **Canadian Journal of Chemistry**, v. 70, n. 2, p. 612–630, fev. 1992

SUN, Y. et al. Neurotoxicidade combinada de microplásticos envelhecidos e tiametoxam nos estágios iniciais de desenvolvimento do peixe-zebra (*Danio rerio*). **Environmental Pollution**, v. 348, p. 123853, 1 maio 2024.

SURENDRAN, U. et al. Microplastics in terrestrial ecosystem: Sources and migration in soil environment. **Chemosphere**, v. 318, p. 137946, 1 mar. 2023.

THANOMSIT, C. et al. Aplicação da Tomografia de Coerência Óptica (OCT) para avaliar os efeitos adversos do 2,4-D dimetilamônio nas alterações morfológicas do camarão *Riceland* (*Macrobrachium lanchesteri*). **Environmental Toxicology and Pharmacology**, v. 113, p. 104608, 1 jan. 2025.

TIRKEY, A.; UPADHYAY, L. S. B. Microplastics: An overview on separation, identification and characterization of microplastics. **Marine Pollution Bulletin**, v. 170, p. 112604, 1 set. 2021.

ULLAH, F. et al. shi. **iScience**, v. 28, n. 2, p. 111879, 21 fev. 2025.

VASUDEVA, M. et al. Advances in microplastic characterization: Spectroscopic techniques and heavy metal adsorption insights. **TrAC Trends in Analytical Chemistry**, v. 183, p. 118111, 1 fev. 2025.

VERMA, A. et al. Systematic review on microplastics as a threat to terrestrial and aquatic environment. **Sustainable Chemistry One World**, v. 3, p. 100013, 1 set. 2024.

WANG, L. et al. Laboratory simulated aging methods, mechanisms and characteristic changes of microplastics: A review. **Chemosphere**, v. 315, p. 137744, fev. 2023.

WISNIEWSKI, F. F. et al. Microplastics and organic contaminants: Investigation of the sorption process on different polymer types. **Journal of Contaminant Hydrology**, v. 272, p. 104567, maio 2025.

WU, S. et al. The vertical migration of a pesticide mixture in sandy soil is strongly driven by their sorption behavior and can be altered by Polyethylene Microplastics. **Journal of Hazardous Materials**, v. 494, p. 138511, 15 ago. 2025.

WU, T. et al. Microplastic pollution of threatened terrestrial wildlife in nature reserves of Qinling Mts., China. **Global Ecology and Conservation**, v. 51, p. e02865, 1 jun. 2024.

XU, M. et al. Investigation of the effects of polyethylene microplastics at environmentally relevant concentrations on the plant-soil-microbiota system: A two-year field trial. **Science of The Total Environment**, v. 954, p. 176341, 1 dez. 2024.

XUE, Q. et al. Multiscale computational simulation of pollutant behavior at water interfaces. **Water Research**, v. 250, p. 121043, 15 fev. 2024.

YAN, F. et al. Meta-analysis shows that microplastics affect ecosystem services in terrestrial environments. **Journal of Hazardous Materials**, v. 480, p. 136379, 5 dez. 2024.

YANG, S. J. et al. Review of microplastics in soils: state-of-the-art occurrence, transport, and investigation methods. **Journal of Soils and Sediments**, v. 24, n. 2, p. 779–792, fev. 2024.

ZHANG, Q. et al. Adsorption of neonicotinoid insecticides by mulch film-derived microplastics and their combined toxicity. **Science of The Total Environment**, v. 955, p. 177238, 10 dez. 2024.

ZHAO, G. et al. Adsorption mechanism of cefradine on three microplastics: A combined molecular dynamics simulation and density functional theory calculation study. **Science of The Total Environment**, v. 951, p. 175690, 15 nov. 2024.

ZHAO, K. et al. Separation and characterization of microplastic and nanoplastic particles in marine environment. **Environmental Pollution**, v. 297, p. 118773, 15 mar. 2022.

ZHENG, Y. et al. Uma nova degradação sinérgica de microplásticos de polietileno por *Pichia pastoris* recombinante e lacase purificada. **Journal of Cleaner Production**, v. 534, p. 147073, 1 dez. 2025.