

DESENVOLVIMENTO DE SOFTWARE AUXILIAR PARA QUANTIFICAÇÃO DE ESPÉCIES REATIVAS DA ÁGUA ATIVADA POR PLASMA

Sophia Franzoni Azevedo Souza, Luiz Henrique Pinto Marques, Gabrielly Pellegrini de Andrade Ribeiro, Mayara Lemos Tranco, Maiara Lima Castilho

Laboratório de Bionanotecnologia, Universidade do Vale do Paraíba/Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento, Avenida Shishima Hifumi, 2911, Urbanova - 12244-000 - São José dos Campos-SP, Brasil, sophia.franzoni@univap.br, luizhpmarques@gmail.com, bio.pellegrini@gmail.com, mayaratrancho@gmail.com, mcastilho@univap.br.

Resumo

O plasma, conhecido como o quarto estado da matéria, quando gerado em condições próximas à temperatura e pressão ambiente, recebe o nome de plasma frio e se destaca pela capacidade de produzir espécies reativas de oxigênio e nitrogênio, como peróxido de hidrogênio, nitrito e nitrato, reconhecidas pelo seu potencial oxidante e antimicrobiano. Entre suas formas de aplicação, destaca-se a água ativada por plasma, de interesse em áreas como agricultura, indústria de alimentos e medicina. A quantificação dessas espécies é fundamental para compreender e otimizar tais aplicações, mas métodos convencionais, como análises manuais, podem ser suscetíveis a erros e demandar tempo. Neste trabalho, desenvolveu-se um *software* interativo em *Python*, executado no Google Colab, para automatizar o cálculo da concentração de nitrito, nitrato e peróxido de hidrogênio. O programa utiliza equações de calibração previamente definidas e gera gráficos com o coeficiente de determinação (R^2), permitindo análises rápidas, padronizadas e confiáveis. Os testes demonstraram que o *software* é acessível, de fácil uso e consistente com modelos experimentais, reduzindo falhas operacionais e padronizando resultados.

Palavras-chave: Plasma frio. PAW. *Software*. Quantificação. Espécies reativas.

Área do Conhecimento: Engenharia biomédica.

Introdução

O plasma, conhecido como o quarto estado da matéria, é um gás parcialmente ou totalmente ionizado, composto por elétrons, íons, radicais livres e partículas neutras (BORGES, 2016; GAO; FRANCIS; ZHANG, 2022). Quando gerado em temperatura e pressão próximas às ambientais, condição denominada plasma frio, apresenta grande potencial para aplicações tecnológicas e biomédicas devido à sua capacidade de produzir espécies reativas de oxigênio e nitrogênio (*Reactive Oxygen and Nitrogen Species*, RONS). Essas espécies incluem radicais de curta duração e compostos estáveis, como peróxido de hidrogênio (H_2O_2), nitrito (NO_2^-) e nitrato (NO_3^-), com reconhecida atividade oxidante e antimicrobiana (GAO; FRANCIS; ZHANG, 2022; SHANKER et al., 2023).

Uma das formas de aplicação do plasma frio é a água ativada por plasma (Plasma Activated Water, PAW), obtida pela exposição de um jato ou descarga de plasma à água. Durante esse processo, as interações entre o plasma, o gás de alimentação e o meio líquido resultam em reações químicas que alteram as propriedades físico-químicas da água, como pH, potencial de oxirredução e condutividade, além de promover o acúmulo das espécies reativas formadas (HAN et al., 2023). Essas características conferem à PAW propriedades de interesse em áreas como agricultura, indústria de alimentos, esterilização e na medicina, principalmente por ser uma alternativa no combate a infecções resistentes a antibióticos, na desinfecção de superfícies hospitalares, no tratamento de feridas crônicas e queimaduras, sua ação seletiva contra microrganismos, aliada à baixa toxicidade em células humanas, torna a PAW uma ferramenta eficaz (XU et al., 2020).

A composição e a estabilidade das espécies reativas presentes na PAW dependem de diversos fatores, incluindo o tipo de plasma utilizado, os gases aplicados, o tempo de exposição, a distância entre o jato e a superfície do líquido e as condições de armazenamento (OLIVEIRA et al., 2022). Entre os diferentes dispositivos, o plasma tipo *gliding arc* se destaca por operar em condições atmosféricas e apresentar alta eficiência na geração de RONS (RIBEIRO, 2020). No entanto, a dinâmica de formação e degradação dessas espécies ao longo do tempo ainda é um campo em desenvolvimento,

especialmente em relação ao impacto do tempo de exposição ao plasma e do intervalo decorrido após a ativação. Compreender o comportamento temporal dessas espécies é essencial para otimizar a aplicação da PAW, garantindo que suas propriedades químicas sejam preservadas até o momento do uso.

O desenvolvimento de ferramentas computacionais auxiliares surge como uma solução estratégica para tornar os processos de quantificação mais rápidos, confiáveis e acessíveis. A análise de espécies reativas por métodos espectrofotométricos depende da construção de curvas de calibração e da correta interpretação dos valores de absorbância. Embora seja possível realizar esses cálculos manualmente, tal abordagem é suscetível a erros e demanda tempo considerável em atividades repetitivas.

O avanço das tecnologias digitais, associado à popularização de plataformas de programação acessíveis como o Google Colab, possibilita a integração entre experimentação laboratorial e processamento de dados em ambiente computacional. O uso de ferramentas computacionais apresenta benefícios significativos para a prática científica: reduz a chance de erros de cálculo, padroniza análises, acelera a interpretação dos dados e contribui para a formação de bancos de dados experimentais mais consistentes. Além disso, com o executável no Google Colab, o *software* terá caráter aberto, podendo ser facilmente adaptado, compartilhado e aprimorado. Essa característica reforça o papel da interdisciplinaridade entre as engenharias e as ciências aplicadas, favorecendo o avanço tecnológico e a difusão do conhecimento. Portanto, o presente trabalho propõe e descreve o desenvolvimento de um *software* interativo para auxiliar na quantificação de espécies reativas na PAW, com foco em nitrito, nitrato e peróxido de hidrogênio. A ferramenta permite a inserção dos valores de absorbância obtidos experimentalmente, realizando automaticamente o cálculo das concentrações correspondentes e exibindo graficamente na curva de calibração correspondente. Dessa forma, o *software* se destaca como um recurso prático e didático, com potencial de aplicação em pesquisas voltadas às tecnologias baseadas em plasma frio.

Metodologia

Água Ativada por Plasma

A ativação da água foi realizada utilizando um sistema de plasma do tipo *gliding arc*, operando com potência de 18,4 W e frequência de 60 Hz. O dispositivo foi configurado com fluxos de argônio e ar comprimido. Para cada ensaio, 100 mL de água deionizada foram posicionados a 2 mm da saída do plasma e expostos ao tratamento de 45 minutos.

Curva de calibração das espécies reativas

As curvas de calibração para nitrito, nitrato e peróxido de hidrogênio foram obtidas utilizando padrões preparados a partir de soluções estoque previamente padronizadas. Empregou-se o método colorimétrico descrito no *Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater* para determinação das curvas de nitrito (sessão 4500-NO₂⁻ B) e para o nitrato (4500-NO₃⁻ E). Na curva do nitrito, foram preparadas soluções padrão em concentrações conhecidas, obtidas por diluição da solução intermediária, e adicionou-se 2 mL do reagente de cor (sulfanilamida e N-(1-naftil)etilenodiamina dihidroclorato em meio de ácido fosfórico) a 50 mL da amostra ou padrão. A leitura foi realizada entre 10 minutos e 2 horas após a adição do reagente, em um leitor de microplacas da marca BioTek, modelo Synergy HT a 543 nm. A curva do nitrato, a amostra foi passada por meio da coluna de cádmio para conversão de nitrato em nitrito, e então analisada pelo método colorimétrico para nitrito em um leitor de microplacas da marca BioTek, modelo Synergy HT a 543 nm, seguindo o mesmo procedimento da determinação direta de nitrito.

A quantificação do peróxido de hidrogênio foi realizada pelo método colorimétrico baseado na reação com iodeto de potássio (KI) em meio ácido. Nessa reação, o peróxido oxida o iodeto, formando triiodeto (I₃⁻), cuja coloração amarelada é proporcional à concentração de H₂O₂. Para isso, 200 µL de PAW a 20 µL do reagente apropriado (Titanium (IV) bis (ammonium lactato) dihydroxide. As leituras de absorbância foram realizadas a 410 nm.

Os valores de absorbância obtidos experimentalmente foram utilizados na construção das curvas de calibração de cada espécie, as quais foram ajustadas por regressão linear. A partir desse procedimento, determinaram-se os coeficientes angular e linear das equações, bem como os respectivos coeficientes de determinação (R²). Esses parâmetros foram incorporados ao *software*,

A Ciência do NANO e seu impacto transformador no MACRO

garantindo que as concentrações calculadas fossem consistentes com os modelos obtidos experimentalmente.

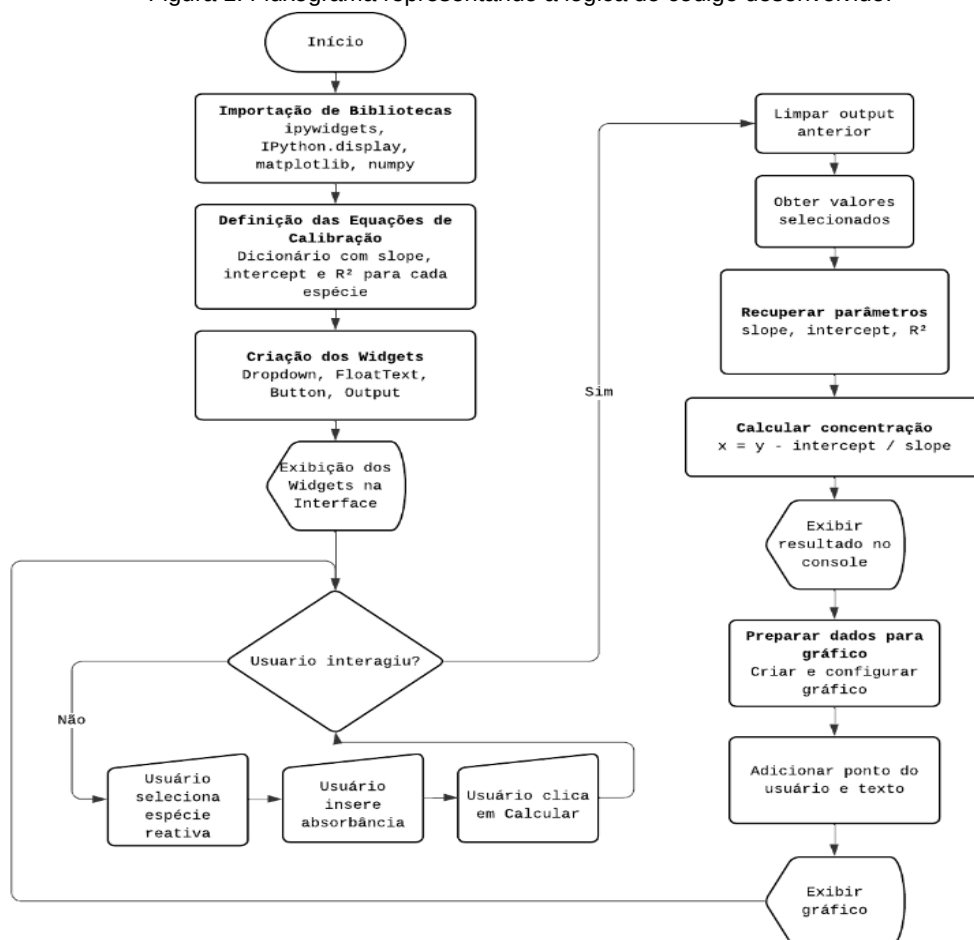
Desenvolvimento do Software

O software foi desenvolvido em linguagem *Python* e executado na plataforma Google Colab, aproveitando recursos de computação em nuvem, acessibilidade e facilidade de compartilhamento de código. O fluxograma que descreve a lógica do código desenvolvido está apresentado na Figura 1.

A construção da interface do programa e manipulação dos dados foram realizadas utilizando os pacotes *ipywidgets*, que permite criar elementos interativos como menus suspensos e campos de entrada de dados; na biblioteca *IPython.display*, foi utilizada para exibir e atualizar dinamicamente os *widgets*; o *numpy*, foi empregado para cálculos numéricos e geração de valores para os gráficos; e a *matplotlib*, foi utilizada para a criação e personalização das representações gráficas das curvas de calibração.

A interface gráfica consiste na construção de um menu suspenso (*dropdown*) para a seleção da espécie reativa a ser quantificada e um campo de entrada de dados (*FloatText*) para que o usuário insira a absorbância obtida experimentalmente, como descrito no fluxograma (Figura 1) no comando de criação dos *widgets*. Após a definição desses valores, o usuário aciona o botão “cálculo” que executa a função principal do *software*, denominada “*calcular_concentracao*”. Além da saída numérica, a função gera um gráfico da curva de calibração correspondente, incluindo a linha da regressão e o ponto experimental inserido pelo usuário, com destaque da concentração calculada e do R^2 no canto inferior direito do gráfico. Essa visualização permite uma análise rápida da consistência do dado e da confiabilidade da medição.

Figura 1: Fluxograma representando a lógica do código desenvolvido.



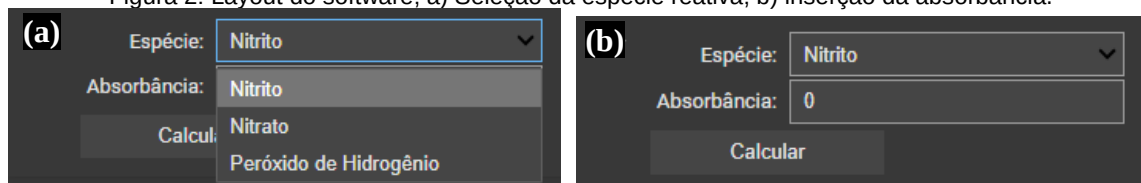
Fonte: Autores, 2025.

A Ciência do NANO e seu impacto transformador no MACRO

Resultados

A execução do software desenvolvido permitiu a quantificação rápida das espécies reativas presentes na PAW, utilizando como base os valores de absorvância obtidos experimentalmente. A interface interativa mostrou-se intuitiva, possibilitando ao usuário selecionar a espécie reativa de interesse e inserir a absorvância correspondente de forma direta (Figura 2).

Figura 2: Layout do software; a) Seleção da espécie reativa; b) inserção da absorvância.



Fonte: Autores, 2025.

A Figura 3 mostra parte do desenvolvimento lógico do código utilizado para o cálculo da concentração das RONS. Dentro da função "calcular_concentracao", primeiramente são acessados os parâmetros de regressão previamente definidos em um dicionário no código (equações), contendo o coeficiente angular, intercepto e coeficiente de determinação (R^2) de cada espécie. Em seguida, o programa calcula a concentração da espécie selecionada a partir da absorvância informada pelo usuário (y) aplicando a equação de calibração linear ($x = (y - \text{intercept})/\text{slope}$), como observado na Figura 1. Esse valor corresponde à concentração em mg/L e é apresentado no console junto com o R^2 da regressão.

Figura 3: Código em Python para cálculo da concentração das espécies reativas na PAW.

```
def calcular_concentracao(change):
    with saida:
        clear_output()
        especie = especie_dropdown.value
        y = absorvancia_input.value

        # Puxa os parâmetros da espécie
        slope, intercept, r2 = equacoes[especie]

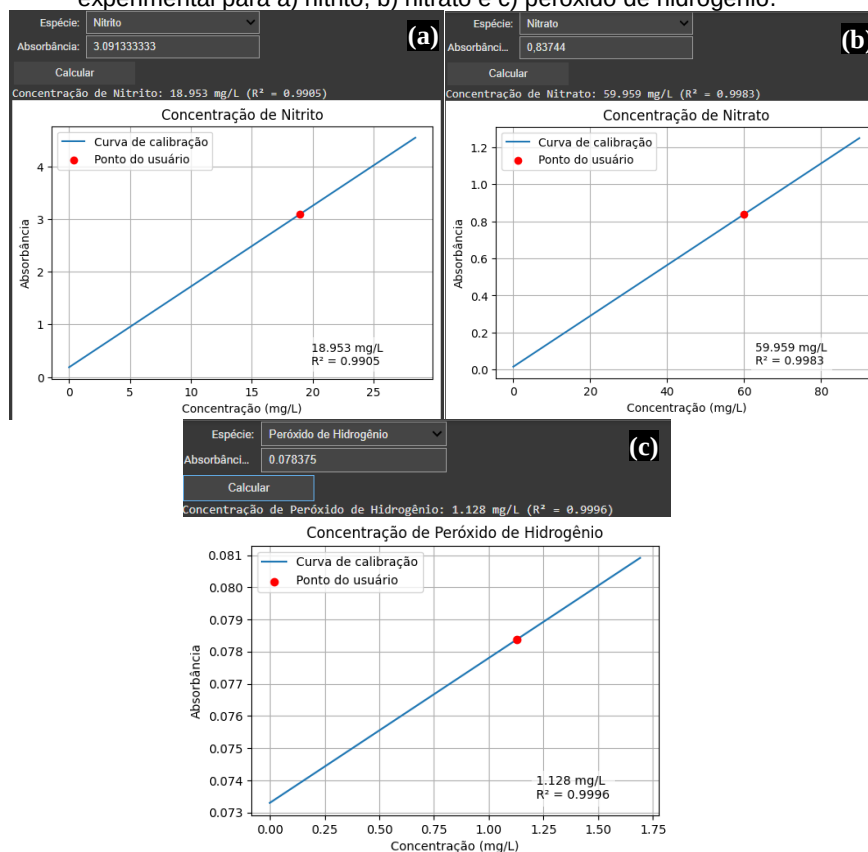
        # Calcula a concentração
        x = (y - intercept) / slope

        # Mostra o resultado no console
        print(f"Concentração de {especie}: {x:.3f} mg/L ( $R^2 = {r2:.4f}$ )")
```

Fonte: autores, 2025.

Após a inserção dos dados, o programa calcula automaticamente a concentração da espécie selecionada utilizando a equação de calibração linear correspondente. Além disso, gera um gráfico que relaciona a absorvância à concentração, destacando o ponto experimental informado pelo usuário e a linha de regressão obtida a partir das curvas de calibração previamente definidas (Figura 4). As funcionalidades implementadas permitem não apenas visualizar rapidamente os resultados, mas também avaliar a confiabilidade da medição, considerando o coeficiente de determinação (R^2) exibido junto à concentração calculada. A interatividade do software facilita a análise de múltiplas amostras, contribuindo para a padronização e agilidade nos experimentos com PAW.

Figura 4: Exemplo dos gráficos gerados pelo software, mostrando a curva de calibração e o ponto experimental para a) nitrito, b) nitrato e c) peróxido de hidrogênio.



Fonte: Autores, 2025.

Discussão

Os testes realizados demonstraram que o programa é capaz de processar diferentes espécies reativas (nitrito, nitrato e peróxido de hidrogênio) e fornecer resultados consistentes com os modelos experimentais obtidos nas curvas de calibração. Dessa forma, a ferramenta cumpre seu objetivo de apoiar a quantificação de espécies reativas, reduzindo possíveis erros manuais e acelerando a interpretação dos dados laboratoriais.

O software desenvolvido neste trabalho apresenta uma abordagem inovadora para a quantificação de espécies reativas em água ativada por plasma (PAW), oferecendo vantagens significativas em relação aos métodos tradicionais. Enquanto métodos manuais, como tiras de teste colorimétricas ou leituras em microplacas, dependem da interpretação do usuário e podem estar sujeitos a erros operacionais (SANTOS, 2021), o programa automatiza o cálculo da concentração a partir de valores de absorbância, garantindo precisão e padronização dos resultados.

Comparado a softwares comerciais ou soluções laboratoriais existentes, o programa se destaca por sua acessibilidade e facilidade de uso, podendo ser executado diretamente no Google Colab, sem necessidade de instalação de pacotes complexos. Essa característica permite que estudantes, pesquisadores e profissionais de diferentes áreas possam utilizá-lo, adaptá-lo e compartilhá-lo facilmente. Além disso, a geração automática de gráficos de calibração e exibição de R^2 proporciona uma visualização imediata da confiabilidade das medições, recurso muitas vezes ausente em métodos manuais.

Conclusão

O trabalho desenvolveu um software interativo em *Python*, executado no Google Colab, para quantificação de espécies reativas em água ativada por plasma (PAW), automatizando cálculos de

A Ciência do **NANO** e seu impacto transformador no **MACRO**

concentração e geração de gráficos de calibração. A ferramenta mostrou-se acessível, de fácil uso e capaz de reduzir erros manuais, padronizar análises e agilizar interpretações, com potencial de adaptação por diferentes pesquisadores. Como perspectivas, destacam-se a ampliação do intervalo de concentrações, a inclusão de análises de múltiplas amostras e estatísticas automáticas, fortalecendo sua aplicação em contextos laboratoriais, industriais e agrícolas, além de contribuir para o avanço científico e tecnológico na área de plasma frio.

Referências

BORGES, A. C. **Atividade antifúngica e citotoxicidade do jato de plasma frio sob pressão atmosférica**. 2016. 120 f. Dissertação (Mestrado em Ciências) – Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2016.

GAO, Y.; FRANCIS, K.; ZHANG, X. Review on formation of cold plasma activated water (PAW) and the applications in food and agriculture. **Food Research International**, v. 157, p. 111246, 2022. DOI: 10.1016/j.foodres.2022.111246.

SHANKER, M. A. et al. Implications of cold plasma and plasma activated water on food texture – a review. **Food Control**, p. 109793, 2023. DOI: 10.1016/j.foodcont.2023.109793.

HAN, Q. Y.; WEN, X.; GAO, J. Y.; ZHONG, C. S.; NI, Y. Y. Application of plasma-activated water in the food industry: a review of recent research developments. **Food Chemistry**, v. 405, p. 134797, 2023. DOI: 10.1016/j.foodchem.2022.134797.

OLIVEIRA, M. et al. Plasma-activated water: a cutting-edge technology driving innovation in the food industry. **Food Research International**, v. 156, p. 111368, 2022. DOI: 10.1016/j.foodres.2022.111368.

RIBEIRO, R. P. **Desenvolvimento e modelagem de uma fonte de plasma intermediário tipo arco deslizante com campo magnético e cátodo cilíndrico entalhado**. 2020. 150 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Elétrica) – Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020.

SANTOS, J. L. O. **Estratégias analíticas para determinação de nitrito e nitrato em matrizes ambientais e alimentícias, empregando análise de imagens digitais**. 2021. 130 f. Dissertação (Mestrado em Química Analítica) – Universidade Federal da Bahia, Salvador, 2021.

XU, D. et al. Effects of plasma-activated water on skin wound healing in mice. **Microorganisms**, v. 8, n. 7, p. 1091, 2020. DOI: 10.3390/microorganisms8071091. Disponível em: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/32708347/>. Acesso em: 20 ago. 2025.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES).