



Danielle Cangussu

Lucas Hoffmann Greghi Kalinke

Organizadores

Editora IFG



IV Encontro Regional da Sociedade Brasileira de Química da Região Centro-Oeste

**Química nas fronteiras do desenvolvimento científico e
social do Centro-Oeste**

Livro de Resumos

Goiânia – GO

29 a 31 de março de 2021.

R429

Resumos do IV Encontro Regional da SBQCO/ Organização:

Danielle Cangussu, Lucas Hoffmann Greghi Kalinke. –

Goiânia: IFG, 2021.

v. único: il.

ISBN 978-65-990897-8-7

1. Química. 2. Ensino de química. I. Cangussu,
Danielle, org. II. Kalinke, Lucas Hofmann Greighi, org. III.
IV Encontro Regional da SBQ Centro-Oeste.

Catálogo na publicação:

Maria Aparecida Andrade de Oliveira Tsu – CRB/1-1604

ISBN: 978-65-990897-8-7

Diretoria da SBQ

Presidente:	Romeu Cardozo Rocha Filho (UFSCar)
Presidente Sucessora:	Shirley Nakagaki Bastos (UFPR)
Vice-Presidente:	Luiz Gonzaga de França Lopes (UFC)
Secretário Geral:	Fernando de Carvalho da Silva (UFF)
Secretário Adjunto:	Márlon Herbert F. B. Soares (UFG)
Tesoureira:	Lídia Moreira Lima (UFRJ)
Tesoureira adjunta:	Carolina Horta Andrade (UFG)

Comissão Organizadora

Coordenadora Geral:	Danielle Cangussu de Castro Gomes (UFG)
Vice Coordenadora:	Andrea Rodrigues Chaves (UFG)
Tesoureira:	Emília Celma de Oliveira Lima (UFG)

Boniek Gontijo Vaz (UFG)
Cecília Oliveira (UFG)
Fábio Luiz Paranhos Costa (UFJ)
Flavio Colmati (UFG)
Gleison Casagrande (UFMS)
João Batista Lopes Martins (UNB)
Lucas Pizzuti (UFGD)
Lucília Kato (UFG)
Marlon Soares (UFG)
Tatiane Moraes Arantes (UFJ)
Wendell Coltro (UFG)

Comitê Científico

Aline Lima de Oliveira (UNB)
Carlos Cezar da Silva (IFG – Jataí)
Claudio Roberto Machado Benite (UFG)
Cristiane Stork Schwalm (UFGD)
Fabiana Aparecida Marques (IFGoiano – Ceres)
Felipe Terra Martins (UFG)
Freddy Fernandes Guimarães (UFG)
Gabriela Rodrigues Mendes Duarte (UFG)
Lívia Florio Sgobbi (UFG)
Lucas Hoffmann G. Kalinke (IFG – Anápolis)
Luciano M. Lião (UFG)
Monique Ferreira Marques (UEG)
Monise Canova Coltro (IFG – Senador Canedo)
Nyuara Araújo da Silva Mesquita (UFG)
Rafael Pavão das Chagas (UFG)
Vanessa Gisele Pasqualotto Severino (UFG)
Vanessa Nunes Alves (UFG)
Vania Denise Shwade (UFGD)

Todas as informações dos resumos publicadas neste livro foram reproduzidas de cópias fornecidas pelos autores. O conteúdo dos resumos é de exclusiva responsabilidade de seus respectivos autores. Os organizadores do livro, a comissão organizadora e comitê científico do evento, assim como a SBQ e a editora IFG não se responsabilizam por consequências decorrentes do uso dos dados, afirmações e opiniões inexatos (ou que resultem a erros) publicados no presente livro de resumos.

Realização



Sociedade Brasileira de Química



Apoio Financeiro



Apresentação

Prezados(as) colegas,

Há poucos dias do início do IV Encontro Regional da Sociedade Brasileira de Química – Centro Oeste, IV ERSBQ-CO, previsto inicialmente para ser realizado em Goiânia, no período de 23 a 25 de março de 2020 na Universidade Federal de Goiás (UFG), fomos surpreendidos com o início de uma quarentena no Brasil devido a instalação da pandemia da COVID-19. Naquele momento todos os eventos presenciais foram suspensos na UFG, e o que esperávamos ser um advento passageiro, já toma 12 meses das nossas vidas. Sentimos muito pelas quase 300 mil vidas perdidas para COVID-19 em nosso país, e pelo estado de sofrimento causado a todos neste momento em que a situação se agrava. Enviamos nossa solidariedade todas famílias que perderam seus entes queridos.

A comissão organizadora trabalhava pela realização do evento deste abril de 2019, quando foram enviadas propostas para solicitação de verbas nos editais o CNPq e CAPES. Tivemos a satisfação de recebermos o financiamento desses órgãos e recebermos ainda os patrocínios das empresas BUCHI, Quantum Design – Latin America e Allcrom. Foram convidados importantes nomes da química brasileira para compor a programação com palestras e minicurso. Esperávamos cerca de 250 participantes de todos os estados da região centro-oeste e outros estados do país. Em decorrência das limitações impostas pela pandemia, a comissão decidiu pelo cancelamento do evento.

Em face de todos esses acontecimentos, decidimos realizar o evento no formato virtual entre os dias 29 e 31 de março de 2021. Utilizaremos da plataforma da empresa *Softaliza* para criar um ambiente virtual agradável para que todos possam congregarem neste novo formato. A programação do evento foi adequada ao novo formato mantendo praticamente todas as palestras e minicurso. A apresentação dos trabalhos nos formatos pôster e oral foram submetidos na forma de vídeos que ficarão disponíveis na plataforma para visualização e interação entre os participantes. Apesar dos desafios do momento atual, esperamos que as 250 pessoas inscritas no evento aproveitem a oportunidade para fortalecer ainda mais a comunidade química na região centro-oeste.

Danielle Cangussu de Castro Gomes

Coordenadora geral do
IV Encontro Regional da SBQ-CO
Vice-secretária da SBQ-GO

Índice de Resumos

ENSINO DE QUÍMICA

Audiodescrição na experimentação no ensino de química para alunos com deficiência visual: um breve estudo	16
Amanda A. A. Morais, Gustavo N. Vargas, Mislene S. G. Oliveira, Fernanda A. França, Anna M. C. Benite, Claudio R. M. Benite.	
Contribuições da técnica de RMN na discussão sobre o uso do formaldeído para alisamento capilar no ensino de Química	17
Thaís S. Lima, Brunno A. Ruela, Victor B. M. Silva, Gerlon A. R. Oliveira, Luciano M. Lião, Anna M. C. Benite, Claudio R. M. Benite.	
Cosméticos: uma proposta de experimentação para alunos com deficiência visual no ensino de funções orgânicas	18
Mislene da S. G. Oliveira, Fernanda, A. França, Claudio R. M. Benite.	
Criação de balança semi-analítica vocalizada para a inclusão de alunos com deficiência visual em aulas experimentais	19
Gustavo Nobre Vargas, Ramon J. S. Araújo, Daniell R. Alves, Ronneesley Moura Teles, Anna M. C. Benite, Claudio R. M. Benite.	
Currículo dos cursos de Licenciatura em Química em período de transformação: Uma análise quanto à perspectiva CTS	20
Nilma S. Izarias, José C. Del Pino, Eniz C. Oliveira.	
Divulgação da técnica de Ressonância Magnética Nuclear na disciplina de Química Geral para a Engenharia de Produção	21
Brunno A. Ruela, Thaís de S. Lima, Gustavo A. A. Faustino, Andressa K. Silva, Luciano M. Lião, Anna M. C. Benite, Claudio R. M. Benite.	
Educação para as Relações Étnico-Raciais (ERER): A experiência do Instituto de Química da UFG (IQ/UFG)	22
Juvan P. da Silva, Gustavo A. A. Faustino, Antônio C. B. Alvino, Marysson J. R. Camargo, Claudio R. M. Benite, Anna M. C. Benite.	
Estratégias de ensino utilizadas pelos professores formadores em cursos de Licenciatura em Química do Estado de Goiás.	23
Nilma S. Izarias, José C. Del Pino, Eniz C. Oliveira.	
Formação de professores/as de química em espaço não formal: um debate sobre gênero, raça e sexualidade	24
Morgana A. Bastos, Gustavo A. A. Faustino, Regina N. Vargas, Marta C. de Oliveira, Anna M. C. Benite, Cláudio R. M. Benite.	
Harry Potter científico, um RPG para ensino de Química e Magia	25
Mariana F. Herculano, Márlon H. F. B. Soares.	
Leituras de Inscrições no Ensino Superior de Química	26
Mikeas Silva de Lima, Henrique Meisegeier Larine, Salete Linhares Queiroz.	
O Emprego da Equoterapia no Tratamento do Déficit de Atenção e Hiperatividade (TDAH)	27
Paulo Henrique Silva S, Ilmo Silva C.	
O Ensino de Química na Perspectiva da Educação Ambiental através de Mapas Conceituais	28
Maria Paula P. R. P. Castro, Janaína S. Stiz.	

Os Projetos Pedagógicos dos Cursos de Licenciatura em Química: problemas na publicização dos documentos	29
Yasmine Fernandes Oliveira, Nyuara Araújo da Silva Mesquita.	
Saberes tradicionais e a construção de uma farmácia popular	30
Brunno S. Souza, Gabriela F. Matos, Josellane S. Pires, Hevellyn G. D.Barbosa, Anna M. C. Benite.	
Uma Análise da Linguagem Empregada no Ensino de Termoquímica em Livros Didáticos	31
Lucas R. Silva, Ana C. A. F. Gontijo, Carine A. Tales.	

FÍSICO-QUÍMICA

A QTAIM and DFT study of the performance of benzotriazole (BTAH) complex with copper in the electrocatalysis of the oxygen reduction reaction	32
Gabriel R. Martins, Leandro M. C. Pinto.	
Análise de Componente Principal de propriedades de moléculas TKI's.	33
João E. M. Saraiva, Érica C. M. Nascimento, José L. L. Alcantara, Luiz F. Moennich, Letícia A. Nascimento, João B. L. Martins.	
Análise dos Orbitais de Fronteiras de TKI's	34
José L. L. Alcântara, Erica C. M. Nascimento, Luiz F. M. A. Benico, Letícia de A. A. Nascimento, João E. M. Saraiva, João B. L. Martins.	
Caracterização eletroquímica de filmes de Poli(3-metiltiofeno) e blendas de Poli(3-metiltiofeno)/PS dopados com grafeno.	35
Rayssa de S. Lopes, Maria Luiza L. S. Silva, Gildiberto M. Oliveira, Tatiane M. Arantes, Fernando H. Cristovan.	
Desenvolvimento De Um Veículo Baseado Em Amido Solúvel Poroso Para Amorfização Do Fármaco Efavirenz	36
Arturo B. L. Véliz, Karyne C. de Souza, Jackson A. L. C. Resende.	
Docking Molecular de TKIs	37
Luiz Felipe M. A. Benício, João E. Saraiva, José L. L. Alcantara, Luiz F. Moennich, Erica Cristina Moreno Nascimento, João B. L. Martins.	
Efeito de modelador orgânico na síntese de Ce_{0,8}Zr_{0,2}O₂ nanoestruturado para oxidação do material particulado de diesel	38
Pablo T. A. Campos, João P. V. Lima, José A. Dias, Sílvia C. L. Dias.	
Estudo da estabilidade oxidativa do óleo da amêndoa da macaúba e dos seus derivados epóxido e polioli para uso como biolubrificantes	39
Tayane A. M. Serafim, Rodolfo A. Breves, Roseany V. V. Lopes, Maria José A. Sales.	
Estudo das propriedades físico química e biológicas de blendas de poli(3hexiltiofeno)/poli(N-vinilcaprolactama-co-acrilato de n-butila)	40
Sara R. Nahra, Lara Nahra, Mauricio P. Oliveira, Lilia M. Guerrini, Fernando H. Cristovan.	
Estudo de Estrutura Eletrônica de Inibidores da Tirosina Quinase (BCR-ABL T315I)	41
Letícia A. Nascimento, João E. Saraiva, José L. L. Alcantara, Luiz F. Moennich, Érica C. M. Nascimento, João B. L. Martins.	
Estudo DFT de interações de complexos envolvendo H₂S	42
João B. L. Martins, Elfi Kraka, Elton A. S. de Castro.	
Estudo Teórico da reação entre óxido de formaldeído e monóxido de carbono sob efeito da temperatura utilizando a dinâmica molecular de Car-Parrinello	43
Mikaele L. S. Santos, Solemar S. Oliveira.	

Estudo teórico do líquido iônico bmim[PF₆] via dinâmica molecular	44
Pedro Henrique F. Matias, Diullio P. dos Santos, Ana Gabriela C. Oliveira, Heibbe Cristhian B. de Oliveira.	
Inserção e caracterização de ácido fosfotungstico em alumina aplicado à produção de oleato de etila	45
Mateus F. Paiva, Anndréia L. L. Fiusa, José A. Dias, Sílvia C. L. Dias.	
Nanopartículas de CoFe₂O₄@Au: Propriedades Magneto-Plasmônicas	46
Thiago Eduardo P. Alves, Clemens Burda.	
Obtenção de mantas eletrofiadas de blendas PNVCL/PVP	47
Arthur M. Gabriel, Jordanna F. Assis, Emerson R. de Camargo, Fernando H. Cristovan, Tatiane M. Arantes.	
Óxido de titânio suportado em argila para degradação de corante orgânico	48
Péricles J. H. da C. Lemos, Andressa C. de A. Nascimento, Tatiana Batista, Douglas S. Machado.	
Produção de microesferas de quitosana utilizando dois métodos diferentes: coagulação e emulsão	49
Leidemar F. S. Filho, Maria Helena S. Barroso.	
Propriedades físico-químicas da goma de tamboril (<i>Enterolobium contortisiliquum</i>)	50
Gislane O. Ribeiro, Olívia R. Teixeira, Maria Luiza Rezende, Kátia F. Fernandes, Maria Carolina B. Di Medeiros, Luciano M. Lião.	
Propriedades funcionais de amido extraído de semente de abacate	51
Gislane O. Ribeiro, Kátia F. Fernandes, Maria Carolina B. Di Medeiros, Luciano M. Lião.	
Reação de desacetilação da quitosana comercial e obtenção de hidrogéis para uso como biomateriais	52
Raissa F. Araújo, Maria Helena S. Barroso.	
Síntese e aplicação de biocoagulante natural funcionalizado com nanopartículas magnéticas para o tratamento de efluente real de indústria de tinta	53
Jordanna K. R. Aleixo, Mayra S. de Oliveira, Leonardo S. Andrade.	
Síntese e caracterização de catalisadores magnéticos a base de ferro	54
Gabriel A. A. Diab, Sílvia C. L. Dias, José A. Dias.	
Síntese e Caracterização de Poli(L-Ácido Lático-co-Ácido Glicólico) por Policondensação Direta Utilizando Catálise Heterogênea.	55
Naylon B. Gomes, Andréa R. Chaves, Denilson Rabelo.	
Síntese, caracterização e avaliação das propriedades dielétricas do material cerâmico Zn_{1-x}Ga_xO₈	56
Gabriela G. Miranda, Adolfo F. Júnior.	

QUÍMICA ANALÍTICA

Análise de marcadores de consumo de álcool por espectrometria de massas ambiente.	57
Camilla A. Moraes, Carla S. Freitas, Boniek G. Vaz.	
Aplicação de filmes biodegradáveis como sensor colorimétrico para amônia em alimentos estragados	58
Pedro V. V. Romanholo, Maurício V. Cruz, Kátia F. Fernandes, Lívia F. Sgobbi.	
Avaliação de método espectrofotométrico para determinação de triclosan em sabonete líquido	59

Caracterização de Microchip Eletroforético fabricado em vidro e resina foto-curável	60
João Vitor F. Paiva, Gerson F. Duarte Jr., Wendell K. T. Coltro.	
Comportamento térmico das misturas binárias do fármaco Rivaroxabana e os excipientes dióxido de silício coloidal e croscarmelose sódica.	61
Larissa G. Velasco, Almir C. B. Junior, Bruna de A. Costa, Camila C. S. M. Brito, Lucyene N. Matos, Maria Inês G. Leles.	
Construção de um sistema portátil de aquecimento para amplificação de DNA voltadas para aplicações em diagnósticos no <i>point-of-care</i>	62
Marcio N. de Souza, Gabriela G. R. M. Duarte.	
Desenvolvimento de dispositivos eletroquímicos descartáveis para detecção de vitamina D	63
Kamylla P. Venancio, Ana C. A. Ananias, Lívia F. Sgobbi.	
Desenvolvimento de metodologias simplificadas de extrações de agroquímicos em alimentos e solo para a detecção via LC-QTOF-MS	64
Rafael O. Martins, Carla Freitas, Daniel A. Soares, Rosineide C. Simas, Boniek G. Vaz, Andréa R. Chaves.	
Desenvolvimento de sensor eletroquímico de carbono vítreo modificado com éter coroa para determinação de 17β-estradiol em água de abastecimento	65
Felipe B. Arantes, Pedro V. V. Romanholo, Juvenal C. S. Filho, Lívia F. Sgobbi.	
Desenvolvimento de um método de microextração assistida por ar para adsorção de íons Cd²⁺ utilizando pó de café magnetizado.	66
Jussara dos S. Muniz, Vanessa N. Alves.	
Desenvolvimento de uma metodologia HPLC-MS para a análise de ácido cítrico e oxálico em amostras de urina animal	67
Allyster R. Silva, Rafael O. Martins, Rosineide C. Simas, Veridiane R. Gomes, Maria C. S. Fioravanti, Andréa R. Chaves.	
Desenvolvimento e aceitação de bebidas a partir de extratos hidrossolúveis	68
Natan L. Ribeiro, Thábita E. Mota, Rafaella G. Mikaele L. S. Santos, Jéssica Cornélio, Mariana C. J. dos Santos, Kelly N. Marra.	
Deteção colorimétrica de nitrito em dispositivos analíticos fabricados em papel	69
Luisa F. C. Ribeiro, Mauricio M. L. Pereira, Lucas R. de Sousa, Wendell K. T. Coltro.	
Deteção de zika vírus por amplificação isotérmica de DNA mediada por <i>loop</i> em microdispositivos descartáveis de poliéster-toner diretamente em amostras de sangue total, soro, urina e saliva	70
Geovana M. Mendes, Paulo F. N. Estrela, Kézia G. Oliveira, Alexandre M. Bailão, Nilson A. Assunção, Gabriela R. M. Duarte.	
Deteção molecular colorimétrica do Carlavírus em amostras de feijão com smartphone	71
Paulo F. N. Estrela, Josias C. de Faria, Thiago L. P. O. de Souza, Claudio Brondani, Rosana P. Vianello, Gabriela R. M. Duarte.	
Deteção rápida do vírus da chikungunya (CHIKV) baseada em amplificação isotérmica de DNA em microdispositivos descartáveis de poliestireno-toner	72
Kézia G. de Oliveira, Gabriela R. M. Duarte.	
Determinação de agrotóxicos em água utilizando microextração por sorvente empacotado e HPLC-UV	73
Wagner A. De Oliveira Júnior, Silvia de S. Freitas.	

Determinação do perfil químico de frutos de pequi (<i>Caryocar brasiliense</i> Camb.) por <i>Desorption Electrospray Ionization Mass Spectrometry Imaging</i> (DESI-MSI)	74
Ruver R. F. Ramalho, Lanaia I. L. Maciel, Giovanna L. Araújo, Igor Pereira, Rosineide C. Simas, Boniek G. Vaz.	
Dispositivos vestíveis, uma nova ferramenta de baixo custo para diagnósticos clínicos de diabetes mellitus e periodontites	75
Lucas F. de Castro, Soraia V. de Freitas, Lucas da C. Duarte, João A. C. de Souza, Thiago R. L. C. Paixão, Wendell K. T. Coltro.	
Emprego de cascas de mandioca (<i>Manihot esculenta</i>) como biossorvente para remoção de Diuron® em matrizes aquosas	76
Isabela R. Batista, Carlos F. Silva, Fabiana A. Marques.	
Especiação de Cr(III) por extração em fase sólida utilizando <i>Luffa cylindrica</i> magneticamente impregnada	77
Deborah C. Bagano Gonçalves, Jordana de A. N. Oliveira, Vanessa N. Alves.	
Espectrometria de massas por <i>probe electrospray ionization</i> revestido com filme de polipirrol para detecção seletiva de compostos nitrogenados em frações de petróleo	78
Lidya C. Silva, Taynara R. Covas, Ricardo A. Bernardo, Andréa R. Chaves, Felipe P. Fleming, Boniek G. Vaz.	
Estudo da capacidade de adsorção da biomassa de abóbora <i>in natura</i> e tratada para remoção do herbicida Diuron® em matrizes aquosas	79
Carlos F. da Silva, Isabela R. Batista, Fabiana A. Marques.	
Estudo quimiométrico do perfil químico de tomates de mesa por <i>paper spray ionization mass spectrometry</i> (PSI-MS)	80
Ayrton M. S. Santos, Raquel C. Faria, Jean C. P. Sousa, Igor Pereira, Abadia R. Nascimento, Boniek G. Vaz.	
Estudos Eletroquímicos para a determinação de vitamina B12 em dispositivos descartáveis	81
Ana C. A. Ananias, Kamylla P. Venancio, Lívia F. Sgobbi.	
Extração por eletromembrana em um sistema trifásico com conformação “U” para matrizes aquosas	82
Giovanna L. Araújo, Rafael O. Martins, Rosineide C. Simas, Andrea R. Chaves, Boniek G. Vaz.	
Implementação da microfluídica digital para a automatização de ensaios analíticos	83
Danielly S. Rocha, Wendell K. T. Coltro.	
Método de detecção por distância aplicada na volumetria de neutralização em dispositivos microfluídicos fabricados em papel	84
Lorrayne G. A. Dias, Lucas C. Duarte, Wendell K. T. Coltro.	
Metodologia de adsorção em barra utilizando SrTiO₃ como adsorvente para extração de íons Cd²⁺	85
Amanda S. Monteiro, Vanessa N. Alves.	
Microfabricação de dispositivos analíticos em poliéster empregando uma impressora de corte	86
Nikaele S. Moreira, Cyro L. S. Chagas, Karoliny A. Oliveira, Gerson F. Duarte-Junior, Fabrício R. de Souza, Murilo Santhiago, Carlos D. Garcia, Lauro T. Kubota, Wendell K. T. Coltro.	
Modelo cinético de precipitação de asfaltenos, usando tolueno como solvente e heptano como antissolvente.	87
Cristiano F. de A. Júnior, Lidya C. da Silva, Jeferson Valencia, Felipe P. Fleming, Boniek G. Vaz.	
Monitoramento de determinados parâmetros físicos e químicos das águas subterrâneas de abastecimento público em Goiânia e Aparecida Goiânia	88
Nathália K. L. e Silva, Regina A. Nogueira, Lidiane S. de Moraes, Eliane E. Santos.	

Nanocompósito a base de hidroxiapatita/Fe₃O₄ utilizado como catalisador heterogêneo na degradação do corante azul de metileno	89
Fausto E. B. Júnior, Maria D. L. do Nascimento, Willyam R.P. Barros.	
Otimização de um método de extração DPX usando adsorvente natural para adsorção de Pb(II) e Mn(II) e avaliação por isotermas de adsorção.	90
Marina M. Ferreira, Vanessa N. Alves.	
Otimização do controle eletrocinético em microssistemas eletroforéticos	91
Mauricio Matheus L. Pereira, Luisa F. C. Ribeiro, Kemilly M. P. Pinheiro, Wendell K. T. Coltro.	
Preparo e caracterização de filmes nanoporosos de WO₃ para aplicação de fotoeletrocatalise.	92
Giovana M. dos Santos, Marly E. Osugi.	
Quantificação de carbono orgânico do solo por meio da espectroscopia de infravermelho	93
Pedro A. O. Morais, Diego M. Souza, Beata E. Madari, Anselmo E. Oliveira.	
Tratamento de efluente contendo paracetamol com fotocatalise a partir de diodo de luz (LED)	94
Karolayne R. Reis, Rejane D. P. Mota, Thiago J. Corrêa, Brendo A. T. dos Santos, Eduarda A. Prieto, Ítala L. M. Santos, Karen S. Marinho, Milenia C. Souza, Felipe M. A. Souza.	

QUÍMICA INORGÂNICA

Ácidos Maleâmicos N-Substituídos Complexados com Íons Cu(II): Sínteses e Caracterizações	95
Adrielli T. Sobral, Maria A. H. Benuncio, Roberto S. Gomes, Bárbara Tirloni, Eliandro Faoro.	
Acoplamento magnético em polímero de coordenação de manganês	96
Maykon A. Lemes, Felipe T. Martin, Danielle Cangussu.	
Catalisadores de níquel na hidrogenação de óleos residuais do processo de produção de biodiesel	97
Marina R. A. Santos, Vannia C. Dos Santos-Durndell, Gustavo A. da Costa, Diogo K. Nakai, Itânia Pinheiro Soares.	
Catalisadores heterogêneos na desidratação de xilose a furfural	98
Maria Clara H. Clemente, Deborah S. Valadares, Gesley Alex V. Martins, Sílvia Cláudia L. Dias, José A. Dias.	
Complexo de Cd(II) derivado de um ligante do tipo oxamato funcionalizado: Síntese e Caracterização	99
Jhonny W. O. Maciel, Meiry E. Alvarenga, Maykon A. Lemes, Felipe T. Martins, Danielle C. C. Gomes.	
Compósitos de grafeno amassado decorado com NiCo₂O₄ para detecção amperométrica de glucose	100
Thiago S. D. Almeida, Rodrigo V. Salvatierra, Victor H. R. Souza.	
Desidratação da frutose para HMF: Catalisadores e Desafios	101
João P. V. Lima, Pablo T. A. Campos, José A. Dias, Sílvia C. L. Dias, José J. L. León.	
Redução Hidrotermal de platina em carbono comercial para aplicação em células a combustível com camada difusora aberta e fechada	102
Maria Clara H. Clemente, Camila Cafe D. S. Campos, Rayane da S. Cardoso, Gesley A. V. Martins.	
Sais de bis-benzimidazólio próticos como organocatalisadores para a síntese sustentável de carbonatos cíclicos	103
Werberson A. Bezerra, Jorge L. S. Milani, Rafael P. das Chagas.	
Síntese de compósitos entre grafeno amassado/óxido de cobre para aplicação em sensores eletroquímicos de glucose	104
Ana W. B. N. Silva, Leticia M. Alencar, Victor H. R. Souza.	

Síntese e caracterização de complexos de Cu(II) derivados de ligantes oxamatos.	105
Nathália A. Costa, Lucas G. H. Kalinke, Danielle C. C. Gomes.	
Síntese e caracterização de complexos de Cu(II) com novos ligantes híbridos pirazol-imina	106
Guilherme F. Campos, Bárbara Tirloni, Cristiane S. Schwalm.	
Síntese e caracterização de HDLs baseado em α-Ni(OH)₂ como material promissor de eletrodo para sistemas de armazenamento de energia	107
Isabella Fonseca, Cristiane G. Silva, Paulo R. Martins.	
Síntese e caracterização de novos compostos de coordenação de Cu^{II} a partir de um ligante do tipo oxamato	108
Raíssa R. e Silva, Jhonny W. Maciel, Danielle C. Gomes.	
Síntese e Caracterização de um novo Polímero de Coordenação de Cobre(II) com ligante triazólico	109
Bruna A. Rodrigues, Olívia B. O. Moreira, Karyne C. de Souza, Jackson A. L. C. Resende.	
Síntese e caracterização espectroscópica do complexo de Cu(II) derivado de um ligante oxamato	110
Maria Clara O. E. Souza, Pedro V. V. Romanholo, Lucas H. G. Kalinke, Ana K. Valdo, Felipe T. Martins, Lívia F. Sgobbi, Danielle C. C. Gomes.	
Síntese e caracterização estrutural da cadeia [Cu(bpca)](PF₆)	111
Wébia F. da Cruz, Ana K. Valdo, Felipe T. Martins, Danielle Cangussu, Lucas H. G. Kalinke.	
Síntese e caracterização estrutural de complexos de Cu(II) com o ligante glutaraldeído bis(isonicotinilhidrazona)	112
Guilherme P. Soares, Aurillo F. D. Colman, Cristiane S. Schwalm, Bárbara Tirloni, Eliandro Faoro.	
Síntese, caracterização e comportamento eletroquímico do α-Co(OH)₂	113
Cristiane G. Silva, Isabella Fonseca, Paulo R. Martins.	
Síntese, caracterização e propriedades multifuncionais do nanocompósito CoFe₂O₄@SiO₂	114
Yara S. Gomes, Thiago Eduardo P. Alves, Thatielly F. De Almeida.	

QUÍMICA ORGÂNICA

Análise da composição da resina de <i>Mangifera indica</i> L. (Mangueira) e <i>Croton urucurana</i> (Sangra D'água) e Atividade Biológica das mesmas.	115
Ailton C. C. Nascimento, Marília Lamparell, Rosângela M. Rodrigues, Ricardo A. F. Matos.	
Aplicação da extração em fase sólida utilizando polímeros de impressão molecular na quantificação de furanocumarinas do extrato etanólico de mama-cadela (<i>Brosimum gaudichaudii</i>)	116
Maria Eduarda R. dos Santos, Natália Figueiredo Vieira, Karla S. Malaquias.	
Avaliação da atividade antibacteriana da alface silvestre <i>Lactuca canadensis</i>	117
Carla T. P. Coelho, Rossana V. C. Cardoso, Ângela Fernandes, Tania Pires, Lillian Barros, Vanessa G. P. Severino.	
Avaliação da atividade catalítica do ácido 12-tungstosfórico (H₃PW₁₂O₄₀) impregnado em carvão ativado nas reações de esterificação do ácido <i>p</i>-hidroxibenzoico	118
Bianca F. Gonçalves, Karla S. Malaquias.	
Avaliação da atividade catalítica na síntese de 3,3'-(4-irilpiridina-2,6-di-il)bis(2<i>H</i>-cromen-2-ona) via reação multicomponente	119
Bianca F. Souza, Luciana M. Ramos.	
Avaliação do potencial biológico de derivados da Pirimidina-5- carbonitrila	120
Yasmine B. Queiroz, Juliana G. Morais, Jhonathan R. N. dos Santos, Loraine M. D. Xavier, Osvaldo G. Pinto, Luciana M. Ramos.	

Avaliação <i>in silico</i> do potencial multialvo de novos derivados heterocíclicos nas enzimas Acetilcolinesterase e BACE-1	121
Valdinei B. L. Filho, Tauã E. Silva, Fábio L. P. Costa, Breno A. Soares.	
Avaliação <i>in silico</i> do potencial multialvo de novos derivados heterocíclicos nas enzimas Acetilcolinesterase e GSK-3β	122
Tauã E. Silva, Valdinei B. L. Filho, Fabio L. P. Costa, Breno A. Soares.	
<i>Bauhinia holophylla</i> e inibição da arginase de <i>L. amazonensis</i>.	123
Thais B. Vieira, Camila L. Silva, Bruno S. do Amaral, Dulce H. F. de Souza, Izabela M. D. B. Charneau, Richele P. Severino, Lorena R. F. de Sousa.	
Composição química do óleo essencial da casca de <i>Zanthoxylum riedelianum</i> (Rutaceae)	124
Larissa Liz S. Lara, Cristiane de M. Casal, Cássia Cristina F. Alves, Vinícius A. do Nascimento.	
Descoberta de novos inibidores de NSB2-NS3 protease de Zika através da integração de triagem virtual e avaliação experimental	125
Bruna K. P. Sousa, Melina Mottin, Bruno J. Neves, Daniel Foil, Jean A. Bernatchez, Sean Ekins, Jair L. Siqueira-neto, Carolina H. Andrade.	
Desenvolvimento e validação de modelos de aprendizado de máquina para seleção de xantonas inibitórias do receptor do fator de crescimento endotelial (EGFR)	126
Luiza V. Cruz, Steven U. S. Hall, Melina Mottin, Vanessa G. P. Severino, Carolina H. Andrade.	
Diferenciação entre os perfis metabólicos dos peitos de frangos de granja e caipiras usando RMN e quimiometria	127
Enya S. de Oliveira, Gerlon de A. R. Oliveira, Andressa K. Silva, Luciano M. Lião.	
Efeito dos óleos essenciais na atividade biológica cardiovascular – Uma revisão	128
Juliana Moraes dos Reis, Liliane Nebo, Claudinei Alves da Silva, Fábio M. de Oliveira, Núbia de Souza Lobato, Karla S. Malaquias.	
Eletroxidações de Substâncias orgânicas catalisadas por um novo aquacomplexo tripiridilfosfínico de rutênio(II).	129
Claudemir Batalini, Wagner F. De Giovanni.	
Estudo da aplicação do <i>biochar</i> obtido da torta de mamona como catalisador heterogêneo (acidificado com os ácidos sulfúrico e 12- tungstofosfórico) na reação de transesterificação do óleo de rícino	130
Marya H. M. Martins, Karla S. Malaquias.	
Estudo das propriedades físico-químicas e compostos voláteis presentes em polpas de <i>Mauritia flexuosa</i> L.f. (Buriti) no Estado do Tocantins.	131
Marcleane M. Silva, Flamys L. N. Silva, Adriana I. T. Oliveira.	
Estudo do óxido de grafite como catalisador nas reações dos benzimidazóis 1,2-dissubstituídos	132
Raquel F. Naves, Guilherme R. de Oliveira, Christian G. Alonso, Paulo R. Martins.	
Estudo Químico de <i>Lomatozona artemisiifolia</i> Baker e comparação de suas espécies nativa e <i>in vitro</i> através de análises de CLAE-EM/EM e quimiometria	133
Lorrant M. Abreu, Vinícius G. Wakui, Ana P. Terezan, Cecília M. A. de Oliveira, Luiz H. Q. Júnior, Sérgio T. Sibov, Lucília Kato.	
Identificação de novos <i>hits</i> potenciais contra NS5 de Zika através de abordagens de similaridade, <i>docking</i> e modelos de aprendizado de máquina	134
Paulo R. P. S. Ramos, Melina Mottin, Bruna K. P. Sousa, Daniel H. Foil, Kimberley M. Zorn, Sean Ekins, Carolina H. Andrade.	

Influência de diferentes tipos de água e temperaturas na turbidez de cachaças de alambique	135
Karla C. R. C. Morais, Elaine Carvalho Pinto, Eliane Santana Fernandes, Luciano Morais Lião.	
Integração de estratégias de <i>docking</i>, modelos de aprendizado de máquina e avaliação experimental para identificar novos inibidores da glicoproteína de envelope do vírus Zika	136
Melina Mottin, Ana Puhl Rubio, Daniel Foil, Sean Ekins, Carolina Horta Andrade.	
Modelos baseados na forma e volume molecular e de aprendizado de máquina para a identificação de inibidores de aurora cinase 2 de <i>Plasmodium sp.</i>	137
Sabrina S. Mendonça, Joyce V. V. B. Borba, Richard Eastman, Juliana C. Paim, Daniel Y. Bargieri, Carolina H. Andrade.	
N-Arilação intramolecular de hidrazonas tiazolil substituídas para a síntese de 1<i>H</i>-indazóis catalisada por cobre	138
Yara C. M. Barbosa, Bianca S. Rocha, Lucas Pizzuti.	
Novos horizontes da espectrometria de massas de ressonância ciclotrônica de íons com transformada de Fourier (FT-ICR MS): comparativo da detecção dipolar e quadrupolar	139
Danielle M. M. Franco, Jeferson A. V. Dávila, Taynara R. Covas, Talita P. de Brito, Boniek G. Vaz.	
Proposta sintética para Guanilação de Tioureias	140
Anna P. S. Romão, Maísa B. Costa.	
Prospecção química das flores de <i>Pterodon pubescens</i>	141
Alline M. Ribeiro, Adriane da Silveira Gomes, Richele P. Severino, Lorena R. F. de Sousa.	
Síntese de 1<i>H</i>-indazóis através da ciclização intramolecular de fenilhidrazonas catalisada por cobre	142
Yara C. M. Barbosa, Yasmin L. Santos, Lucas Pizzuti.	
Síntese de nanopartículas de alginato.	143
Lorena L. de Freitas, Eloiza da S. N. Viali, Erika C. Resende.	
Síntese de substâncias heteroaromáticas nitrogenadas e investigação do potencial antioxidante	144
Jaciel G. dos Santos, Adriany da Silva, Cynara A. Cintra, Joyce M. dos Santos, Claudemir Batalini.	
Síntese e avaliação do potencial antioxidante <i>in vitro</i> de híbridos de imidazo-[1,2-α]-piridinas e benzimidazóis em núcleos de cumarina	145
Alexandre L. de Paula, Juliana G. de Morais, Jhonathan R. N. dos Santos, Luciana M. Ramos.	
Síntese e caracterização de aditivos antioxidantes aromáticos compatíveis ao biodiesel	146
Ana Luiza R. R. da Cunha, Lilian R. Batista, Aline S. Muniz, Nelson R. Antoniosi Filho.	
Síntese e caracterização de um complexo de paládio(II) contendo um ligantes pirazol-imina derivado do 2-hidróxi-naftaldeído	147
Vitor A. B. Peres, Bárbara Tirloni, Cristiane S. Schwalm.	
Síntese e caracterização ótica do poli(9-9dihexilfluoreno)-co-tiofeno	148
Arthur S. Espíndola, Fernando H. Cristovan.	
Síntese, caracterização e determinação da atividade antioxidante e antibacteriana <i>in vitro</i> de derivados Tetrahidrobenzo[<i>b</i>]piranos	149
Jhonathan R. N. dos Santos, Juliana G. de Morais, Yasmine B. de Queiroz, Osvaldo G. Pinto, Luciana M. Ramos, Luciano Ribeiro.	
Synthesis of terpene-thiosemicarbazide and thiosemicarbazones amino acid derivatives	150
Gabriela F. Matos, Olga S. Rêgo, Lucilia Kato, Cecilia Maria.	
Uso das redes moleculares para desreplicação da fração acetato de etila de <i>Waitea circinata</i>	151
João V. S. de Oliveira, Diego A. Silva, Matheus S. de Souza, Leila G. de Araújo, Lucília Kato.	

Varição da composição química do óleo essencial dos frutos de *Schinus terebinthifolius* Raddi

152

Janaine A. Marangoni, Sidney M. dos Santos, Pedro Cruz O. Jr, Kamilla F. do Nascimento, Julyana A. T. Borges, Anelise S. N. Formagio.

Audiodescrição na experimentação no ensino de química para alunos com deficiência visual: um breve estudo

Amanda A.A. Morais¹ (IC), Gustavo N. Vargas¹ (IC), Mislene S.G. Oliveira¹ (PG), Fernanda A. França¹ (PG), Anna M.C. Benite¹ (PQ), Claudio R.M. Benite¹ (PQ).
amandaarrais@hotmail.com

¹Laboratório de Pesquisas em Educação Química e Inclusão (LPEQ/IQ/UFG).

Palavras-chave: Ensino de química, Educação inclusiva, Audiodescrição, Deficiência visual.

A Química é uma Ciência teórica e prática e os experimentos são atividades orientadas por roteiros para leitura, reprodução e interpretação dos fenômenos observáveis, ambas acompanhadas pelo referencial visual. Numa perspectiva inclusiva, como os alunos com deficiência visual (DV) vão participar dessas atividades? Posto isso, defendemos como essencial a criação de roteiros que atuem como ferramenta da ação mediada para a participação autônoma dos DV nos experimentos.

Contendo elementos da pesquisa participante, o presente trabalho versa sobre as contribuições do uso de roteiros em Braille e fonte aumentada (Figura 1) como tecnologia assistiva para a inclusão de DV em experimento acompanhados por roteiro para a audiodescrição da atividade pelo professor. Participaram deste estudo 2 professores em formação inicial (PFI) e 12 DV (A), realizado em instituição de apoio aos DV de escola pública regular. Após a leitura do roteiro em Braille por A6, PFI1 audiodescreve o grupo funcional éster (extrato 1) para A9 em papel alto-relevo.

Extrato 1

PFI1: Vamos lá. Com a mão direita, desce o dedo, qual é a letra? A9: 'C', carbono. (A9 tateando a molécula).
PFI1: Agora pra cima do lado direito... A9: 'O', oxigênio. PFI1: Agora para baixo e do lado direito... A9: 'O', ligação, 'C'. PFI1: 'C' dupla ligação 'O' para cima, depois o mesmo 'C' ligação simples 'O' para baixo.

A audiodescrição é um tipo de tecnologia assistiva para DV que traduz em palavras toda a informação visual relevante para a compreensão de uma determinada mensagem. PFI1 audiodescreveu o posicionamento dos átomos dispostos no grupo funcional éster no material em alto-relevo elaborado por impressão térmica, acompanhada por alunos de baixa visão por meio de fonte aumentada. Nossos resultados apontam que apesar de possibilitarmos aos DV o uso da Grafia Química Braille, essa é uma Ciência que possui linguagem específica e universal e a pedido dos DV as estruturas moleculares são estudadas com o uso de materiais em alto-relevo e fonte aumentada para que tenham acesso à linguagem representacional como os demais alunos videntes, pois orientada pela audiodescrição de PFI1 atuam como ferramentas essenciais no processo de mediação auxiliando na compreensão do conteúdo ministrado, possibilitando ao DV participação mais autônoma.

Agradecimentos Ao CNPq

Referências

1. BENITE, C.R.M.; BENITE, A.M.C.; BONOMO, F.A.F.; VARGAS, G.N.; ARAÚJO, R.J.S.; ALVES, D.R. A experimentação no Ensino de Química para deficientes visuais com o uso de tecnologia assistiva: o termômetro vocalizado. Química Nova na Escola, v.39, n.3, p.245-249, 2017.
2. ALVES, S.F.; TELES, V.C.; PEREIRA, T.V. Propostas para um modelo brasileiro de audiodescrição para deficientes visuais. Revista Tradução & Comunicação, n.22, 2011.

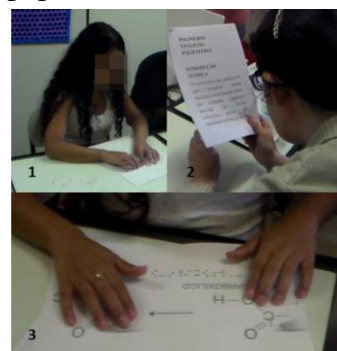


Figura 1: Leitura em Braille (1); Leitura em fonte aumentada (2); audiodescrição do grupo funcional.

Contribuições da técnica de RMN na discussão sobre o uso do formaldeído para alisamento capilar no ensino de Química

Thaís S. Lima¹ (PG)*, Brunno A. Ruela¹ (IC), Victor B. M. Silva¹ (IC), Gerlon A. R. Oliveira² (PQ), Luciano M. Lião² (PQ), Anna M. C. Benite¹ (PQ), Claudio R. M. Benite¹ (PQ). *thaisufgquimica@gmail.com*

¹ Laboratório de Pesquisas em Educação Química e Inclusão – LPEQI, Universidade Federal de Goiás.

² Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear, Universidade Federal de Goiás.

Palavras-chave: Alisamento capilar, Letramento científico, Interdisciplinaridade.

Os “Cosméticos” são produtos tecnológicos presentes na sociedade que podem ser considerados como tema de estudo no ensino de Química por envolverem vários conteúdos científicos que podem ser discutidos a partir de dados experimentais. Neste estudo tratamos de um problema comum dos salões de beleza: o uso indiscriminado de produtos contendo formaldeído para alisamento capilar. Para a Agência Internacional de Pesquisa em Câncer (IARC) o formaldeído pode trazer severas consequências à saúde humana, como câncer de nasofaringe e a probabilidade do desenvolvimento de leucemia.¹ Sendo assim, defendemos a importância desta discussão no ensino de Química para que os estudantes enquanto cidadãos tenham o direito de saber o que estão consumindo e quais as consequências do seu uso constante.

Contendo elementos da pesquisa participante (a autora é professora, cabeleireira e recebe constantemente clientes solicitando tal prática de embelezamento), este trabalho versa sobre o design e aplicação de um objeto virtual de aprendizagem (OVA) intitulado “Alisamento Capilar: sob o olhar microscópico” (Figura 1) como ferramenta da ação mediada. No extrato 1, PG e IC discutem com alunos (A) do 2º ano de uma escola pública de Goiânia dados experimentais de RMN para identificação e quantificação de formaldeído em produtos para alisamento capilar e os efeitos causados pelo seu uso.

Extrato 1

PG: Vocês já fizeram alisamento capilar?

A5: É horrível. Arde o olho, machuca o couro cabeludo, queima!

PG: Você lembra o produto que você usou?

A7: Sei que o formol é usado pra isso!

IC: A RMN é uma técnica que pode contribuir com a regulamentação dessa substância. Vamos ver como determina o percentual do formaldeído presente nos produtos de alisamento capilar.

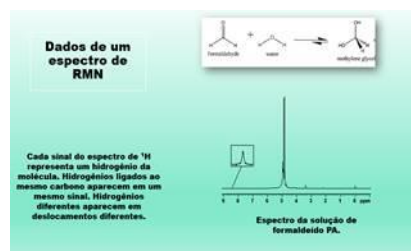
IC: Diante do que já discutimos sobre essa técnica, aqui no OVA, o que esse espectro evidencia?

A2: Que o formaldeído está presente na amostra.

Sobre a profissão de cabeleireiro, no desempenho de suas funções, a IARC a classifica como grupo de risco devido às exposições elevadas às substâncias com potenciais cancerígenos, como o formaldeído, bem como àqueles que fazem uso constante dessa prática capilar.² Assim, defendemos a necessidade de discussão deste tema nas aulas de Química, tanto para o aspecto profissional quanto para a formação cidadã, como meio de esclarecer sobre os possíveis danos causados à saúde pelo uso indiscriminado desses produtos, além de divulgar técnicas específicas da Ciência que muitas das vezes não são vistas nem mesmo no ensino superior.

Agradecimentos Ao CNPQ.

1. IARC. Monographs 100 – F: Formaldehyde, 2004. Disponível em: <https://monographs.iarc.fr/wp-content/uploads/2018/06/mono100F-29.pdf>.
2. HALAL, J. Tricologia e a química cosmética capilar. 5ª ed. São Paulo: Cengage Learning, 2017.



Cosméticos: uma proposta de experimentação para alunos com deficiência visual no ensino de funções orgânicas

Mislene da S. G. Oliveira¹ (PG), Fernanda, A. França¹ (PG), Claudio R. M. Benite¹ (PQ). *mislene@ufg.br*.

¹Laboratório de Pesquisas em Educação Química e Inclusão (LPEQI), Universidade Federal de Goiás.

Palavras-chave: Ensino de Química, Experimentação, Deficiência Visual.

A Química é uma ciência teórico-prática e as observações visuais são expressivas para grande parte da obtenção das informações no ensino de química e considerando as possíveis especificidades da sala de aula, entendemos que o aluno com deficiência visual (DV) pode encontrar limitações para participar efetivamente das atividades, sejam elas teóricas ou principalmente experimentais e, conseqüentemente, não ter uma aprendizagem efetiva.

O presente estudo envolve intervenções pedagógicas com a temática de produção de diversos cosméticos por alunos DV objetivando a possibilidade desse grupo social preparar artefatos de forma independente usando a experimentação (etapa inerente à construção do conhecimento químico, mas excludente a esse grupo social por utilizar da visão como principal meio de coleta de dados) como ferramenta da ação mediada para a aprendizagem de conteúdos relacionados ao estudo das funções orgânicas (OLIVEIRA et. al, 2019).

O desenvolvimento desse estudo é um recorte (um ciclo-espiral) de um estudo mais amplo realizado desde 2009 pelo Laboratório de Pesquisas em Educação Química e Inclusão (LPEQI) em parceria com uma instituição de apoio do estado de Goiás, tendo como metodologia a pesquisa-ação, por envolver planejamento, implementação, descrição e avaliação para aprender mais, durante o processo, tanto a respeito da prática quanto da própria investigação (TRIPP, 2005).

Em uma das intervenções realizamos o preparo de um hidratante labial para o estudo da função orgânica cetona, conforme extrato a seguir.

PC2: Hoje nós vamos fazer um hidratante labial de hortelã, o hortelã possui em sua composição uma cetona chamada carvona, vocês sabem como caracterizar uma cetona?

AI3: Tem uma carbonila, e se a carbonila estiver nos extremos da molécula pode formar um aldeído e se estiver no meio da molécula uma cetona.

PC2: O que significa ela estar no meio?

AI3: Quer dizer que ela não está nos extremos.

PC2: Significa que é um carbono secundário, o carbono da carbonila faz duas ligações com o oxigênio, e ele se liga a mais dois radicais com outros carbonos formando a estrutura molecular.

Os resultados desse trabalho direcionam para uma proposta de ensino buscando novas possibilidades dentro das aulas, a relevância da temática abordada, os cosméticos, permitiu estabelecer questões próximas à vida do estudante e problematizá-las. Além disso, procuramos expandir as fronteiras do conhecimento que são impostas para os alunos DV explicitando o caráter democrático dentro das aulas experimentais no ensino de química.

Referências

1. TRIPP, D. Pesquisa-ação: uma introdução metodológica. Educação e Pesquisa, 31(3), 443-466, 2005.
2. OLIVEIRA, M. S. G.; VARGAS, G. N.; BENITE, A. M. C.; BENITE, C. R. M. Extração do óleo essencial do abacaxi como proposta de experimentação para alunos com deficiência visual. Revista Experiências em Ensino de Ciências. V.14, n.3. 2019.

Criação de balança semi-analítica vocalizada para a inclusão de alunos com deficiência visual em aulas experimentais

Gustavo Nobre Vargas¹ (IC), Ramon J. S. Araújo¹ (IC), Daniell R. Alves¹ (IC), Ronneesley Moura Teles¹ (PQ), Anna M. C. Benite¹ (PQ), Claudio R. M. Benite¹ (PQ).
22gustavohaha@gmail.com

¹Laboratório de Pesquisas em Educação Química e Inclusão (LPEQI), Universidade Federal de Goiás.

Palavras-chave: Ensino de Química, Experimentação, Tecnologia assistiva, Balança vocalizada.

Baseados na relação Ciência, Tecnologia e Sociedade (CTS), entendemos que a pós-modernidade traz consigo a possibilidade de uma Ciência cidadã que não se limita a resolver problemas com soluções universais, pois se atenta aos contextos em que os problemas são gerados buscando valorizar a participação e os conhecimentos empíricos das pessoas afetadas.¹

Pensando nos princípios da igualdade e na importância do protagonismo do aluno no processo de aprendizagem criamos em 2014 um Núcleo que, pautados na cultura Maker, objetiva favorecer o ensino de Química numa perspectiva inclusiva com o desenvolvimento de Tecnologia Assistiva (TA) de laboratório para a inclusão de alunos com deficiência visual (DV) em aulas experimentais. Contendo elementos da pesquisa participante, pautados na necessidade de inclusão deste grupo social nas aulas de Química, neste trabalho discutimos brevemente o uso de uma balança semi-analítica vocalizada na produção de polímero para o ensino da função orgânica éster para DV em uma aula de apoio ao ensino regular público com a participação de 12 alunos (A) e 2 professores em formação inicial (PFI). Objetivamos, também, o desenvolvimento de habilidades técnicas do manuseio da balança e ideia de proporcionalidade dos reagentes, como apresentado no extrato 1.

Extrato 1

PFI2: *Vocês vão pesar o béquer e depois somar 45 gramas de cola branca. Sintam a balança pra verem como ela é. Vocês vão apertar um botão grande para vocalizar.*

A11: *Vou pesar o béquer.*

Balança: *Quarenta e sete vírgula cinquenta sete gramas.*

A10: *Então, no final vai pesar 92,57 gramas!*

PFI2: *Isso mesmo! Agora é só acrescentar a cola até chegar a esse valor.*



Figura 1: Balança vocalizada.

O equipamento possui fonte de alimentação bivolt, é composto por um display LCD com 16x2cm e conectado a uma caixa de som externa (na segunda versão o autofalante é interno) para vocalização das medidas de massa (Figura 1). Sobre a determinação da massa da substância em experimento os laboratórios dispõem comumente de balanças que necessitam da visão como canal de mensura, excluindo os DV.² Considerando a TA como uma área do conhecimento interdisciplinar que reúne recursos, produtos e estratégias para promover a funcionalidade de pessoas com deficiência para a autonomia e inclusão, os resultados demonstram que a balança vocalizada pode ser uma possibilidade de inclusão de DV em atividades experimentais.

Agradecimentos. Ao CNPq.

Referências

1. SANTOS, M.E.V.M. Cidadania, conhecimento, ciência e educação CTS. Rumo a "novas" dimensões epistemológicas. Revista CTS, v.6, n.2, p.137-157, 2005.
2. OLIVEIRA, M.S.G.; VARGAS, G.N.; BENITE, A.M.C.; BENITE, C.R.M. Extração do óleo essencial do abacaxi como proposta de experimentação para alunos com deficiência visual. Experiências em Ensino de Ciências, v.14, n.3, p.72-85, 2019.

Currículo dos cursos de Licenciatura em Química em período de transformação: Uma análise quanto à perspectiva CTS

Nilma S. Izarias¹ (PG), José C. Del Pino² (PQ), Eniz C. Oliveira³ (PQ).
nilma.silvania@ifg.edu.br

¹IFG - Instituto Federal de Goiás; ^{2,3} UNIVATES - Universidade do Vale do Taquari.

Palavras-chave: Formação de professores, Ciência-Tecnologia-Sociedade (CTS), Química, Currículo.

O modelo de escola do século XXI nasceu há cerca de 150 anos, resistindo a críticas e adaptações, por outro lado, tem evidenciado dificuldades em responder a versatilidade da modernidade tecnológica. A escola que conhecemos encontra-se em um momento de metamorfose, alterando seu formato, ou seja, está descobrindo novas possibilidades do processo de ensinar e aprender (NÓVOA, 2019). A perspectiva Ciência-Tecnologia e Sociedade (CTS) na Educação tem se evidenciado como campo promissor neste modelo em mutação, pois parte de um entendimento crítico dos conhecimentos científicos, tecnológicos e seu impacto social (BAZZO, 2018). Ela busca meios de proporcionar a construção de uma consciência que possibilite a fundamentação de decisões democráticas e sociocientíficas frente aos desafios cotidianos. Este trabalho objetivou analisar o campo curricular da Resolução CNE/CP nº 02 de 2019 e os planos de ensino dos professores formadores quanto à perspectiva Ciência-Tecnologia e Sociedade (CTS) em cursos de Licenciatura em Química na região Centro-Oeste do Brasil. A metodologia deste estudo caracterizou-se como qualitativa com abordagem descritiva e exploratória. Realizou-se uma busca pelos documentos no site do MEC e das Instituições Públicas de Ensino que oferecem o curso de Licenciatura em Química. Foram localizados a Resolução e 115 planos de ensino do ano de 2020, que compuseram o corpus deste estudo. Utilizou-se da análise de conteúdo, segundo as orientações de Bardin (2016), tendo como instrumento de coleta de dados um quadro de categorias e indicadores pré-estabelecidos. O *software* NVivo® auxiliou na análise dos dados. Os resultados da análise das Diretrizes para a formação de professores que o currículo está delimitando uma multiplicidade de saberes e aprendizagens práticas ainda dentro do processo inicial de formação, considerando a importância da contextualização e interdisciplinaridade como elo entre: o cotidiano e as novas tecnologias, as práticas técnicas e científicas com a atividade prática docente. Foi possível perceber nos planejamentos de poucos professores a preocupação com contexto social, ambiental e cultural dos estudantes, evidenciando a importância de extrapolar os limites físicos da Universidade, indo ao encontro de uma educação para a cidadania e sustentabilidade. Como tendência dos cursos de formação de professores, percebe-se a necessidade de ampliar a preocupação com aspectos sociais, históricos e ambientais.

Agradecimentos:

À Capes e ao IFG.

Referências

1. BARDIN, L. **Análise de Conteúdo**. São Paulo: Edições 70, 2016.
2. BAZZO, W. A. Quase três décadas de CTS no Brasil!. **R. Brasileira de Ensino de Ciência e Tecnologia**, Ponta Grossa, PR, v. 11, n. 2, p. 260-278, maio/ago. 2018.
3. Nóvoa, A. Os Professores e a sua Formação num Tempo de Metamorfose da Escola. **Educação & Realidade**, Porto Alegre, v. 44, n. 3, 2019.

Divulgação da técnica de Ressonância Magnética Nuclear na disciplina de Química Geral para a Engenharia de Produção

Brunno A. Ruela¹ (IC), Thaís de S.Lima¹ (PG), Gustavo A. A. Faustino¹ (IC), Andressa K. Silva¹ (PG), Luciano M. Lião¹ (PQ), Anna M. C. Benite¹ (PQ) Claudio R.M. Benite¹ (PQ). *brunnoruella@gmail.com*

¹Instituto de Química - IQ, Universidade Federal de Goiás.

Palavras-chave: Ensino de Química, RMN, Divulgação científica.

A técnica de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) desenvolve um papel fundamental na identificação e quantificação de substâncias no âmbito das Ciências da Natureza. Utilizando-se e princípios da Química Quântica, radiações eletromagnéticas e cálculo infinitesimal, o equipamento de RMN permite a detecção de muitos núcleos, tais como ¹H, ¹³C, ¹⁵N, ²⁹Si e ³¹P.¹

O profissional de engenharia de produção por sua vez é um profissional generalista que possui uma grande área de atuação, sendo a mais comum: a indústria. Devido a alta aplicabilidade de tal técnica estar inserida no campo de atuação do engenheiro de produção, realizamos uma Intervenção Pedagógica (IP) na disciplina de Química Geral Experimental do referido curso com a temática “Aspectos envolvidos na produção de uma alisamento capilar utilizando a técnica de RMN para o controle de qualidade”. Essa pesquisa conta com elementos da pesquisa participante, por tratar de um problema social, a prática de alisamento capilar, objetivando a reflexão para os usuários desta prática inseridos na cultura do alisamento capilar.

Extrato 1

52	P1	<i>Vocês acham que podemos adicionar metilenoglicol, etilenoglicol no produto e está tudo bem? Vocês como engenheiros de produção sabendo que tem essas substâncias, vocês podem adicionar ao produto e sabem que no aquecimento será liberado formaldeído e a lei permite. Vocês colocariam?</i>
53	A3	<i>Não deveria poder</i>
54	A8	<i>Se a lei permite eu colocaria</i>
55	A3	<i>Eu fiz uma vez, ele mostrou pra mim o verso, o rótulo não tinha, era livre formol, eu lá na inocência fiz só que depois de umas duas semanas aqui tudo onde era a franja deu alergia aqui tudo em mim, em baixo, nas mãos, até hoje eu tenho por causa disso.</i>

Essas intervenções permitiram suscitar aspectos científicos, tecnológicos e sobretudo, políticos e sociais que o engenheiro de produção deve levar em conta no exercício de sua profissão ao desenvolver o controlar a produção de um produto, como mostrado no extrato 1. Pensando esses aspectos, fazemos com que os alunos pense nos diversos atores envolvidos no processo de fabricação de um produto, desde a matéria prima até a sua fabricação. Por apresentar a técnica de RMN e sua aplicabilidade na indústria tanto de alisamento capilar como para outras áreas, promovemos uma divulgação científica sincrônica² uma vez que a aula contava com um pesquisador da área de RMN que poderia de maneira imediata e de acordo com aquele contexto social e a esfera de atuação daquele grupo social, tirar as dúvidas sobre dita técnica.

Agradecimentos Ao CNPq.

Referências

1. MORAES, T.B. e COLNAGO, L.A. Simulação de sinais de RMN através das Equações de Bloch. *Química Nova*, v. 37, n. 8, p. 1410-1416, 2014.
2. Lima, G. S.; Giordan, M. Características do discurso de divulgação científica: implicações da dialogia em uma interação assíncrona. *Investigações em Ensino de Ciências*, v.22, p. 83-95, 2017.

Educação para as Relações Étnico-Raciais (ERER): A experiência do Instituto de Química da UFG (IQ/UFG)

Juvan P. da Silva¹ (PG), Gustavo A. A. Faustino² (IC), Antônio C. B. Alvino³, Marysson J. R. Camargo⁴ (PG), Claudio R. M. Benite⁵ (PQ), Anna M. C. Benite⁶ (PQ), gustavoaugusto531@gmail.com.

¹⁻⁵Coletivo Ciata do Laboratório de Pesquisas em Educação Química e Inclusão (LPEQI/IQ/UFG).

Palavras-chave: ensino, química, relações étnico-raciais.

O Parecer CNE/ CP 3/2004 que estabelece as Diretrizes Curriculares Nacionais (DCN) para a ERER e para o Ensino de História e Cultura Afro-Brasileira e Africana, em seu § 1º diz que as Instituições de Ensino Superior (IES) deverão incluir em seus conteúdos “disciplinas e atividades curriculares dos cursos que ministram a ERER” (BRASIL, 2004, p.1). Com vistas ao cumprimento desse parecer, propomos e desenvolvemos uma disciplina optativa, no IQ/UFG, para os cursos de química, física e biologia cujo título foi “Educação para as Relações Étnico-Raciais (ERER) no Ensino de Ciências”. Passamos agora a tratar de sua apresentação.

Quadro 01: Ementa da disciplina ERER) no Ensino de Ciências.

A ciência e a invenção do racismo. O currículo como elemento de manutenção e/ou superação do racismo. A metalurgia na África e o regime de *Apartheid*. Propriedades do ferro e o papel do ferreiro africano nas sociedades centro-africanas e no Brasil colônia. A herança cultural africana, indígena e portuguesa nas regiões de mineração do estado de Goiás. A química do dendê e a sua importância nas religiões de matriz africana e na culinária afro brasileira. Abordagem etnobotânica acerca de plantas utilizadas nas religiões de matriz africana, em comunidades indígenas e quilombolas.

Nessa disciplina, para cada tópico contido na ementa foram realizadas abordagens culturais diaspóricas africanas e conceituais. O Quadro 02 traz um exemplo de como foi realizada essa abordagem.

Quadro 02: Abordagens cultural diaspórica e conceitual para cada tópico da disciplina.

Tópico da ementa	Abordagem Cultural Diaspórica	Abordagem Conceitual
Propriedades do ferro e o papel do ferreiro africano nas sociedades centro-africanas e no Brasil colônia.	Legado do ferreiro africano e de seus descendentes no campo das artes, mineração e religião.	Reações químicas envolvendo Fe, Ni e Cu. Síntese de uma ferrita. Estabilidade de complexos em solução, efeito quelato.

Estas abordagens foram desenvolvidas abordando a química do ferro e o papel do ferreiro africano nas sociedades centro-africanas e no Brasil colônia e a herança cultural africana, indígena e portuguesa nas regiões de mineração do Estado de Goiás. Conceitos de densidade e viscosidade, ácidos graxos e fitoquímica, foram discutidos com a abordagem cultural sobre a importância do dendê na formação e manutenção da cultura afro-brasileira dos povos, comunidades, saberes tradicionais e de religiões de matriz africana. A química do dendê e a sua importância nas religiões de matriz africana e na culinária afro-brasileira e abordagem etnobotânica acerca de plantas utilizadas nas religiões de matriz africana. A arqueologia da África e suas técnicas foram discutidas as técnicas analíticas usadas em arqueometria (SILVA, 2020).

Agradecimentos

Ao CNPq, CAPES e a UFG.

Referências

Brasil. Ministério da Educação. Diretrizes Curriculares Nacionais para a Educação das Relações Étnico-Raciais e para o Ensino de História e Cultura Afro-Brasileira e Africana. Brasília, 2004.

Silva, J. P. Estudos sobre a formação de professores de química numa disciplina experimental com abordagem cultural diaspórica. Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química (IQ), Programa de Pós-Graduação em Química, Goiânia, 2020.

Estratégias de ensino utilizadas pelos professores formadores em cursos de Licenciatura em Química do Estado de Goiás.

Nilma S. Izarias¹ (PG), José C. Del Pino² (PQ), Eniz C. Oliveira³ (PQ).
nilma.silvania@ifg.edu.br

¹IFG - Instituto Federal de Goiás; ^{2,3} UNIVATES - Universidade do Vale do Taquari.

Palavras-chave: Formação de professores, Química, Estratégias de ensino.

O processo de formação de professores, de acordo com Tardif (2018) deve apresentar um conjunto de estruturas norteadoras que comporão o perfil do profissional que está se formando. O seja, reflete em sua futura ação em a sala de aula. Nessa perspectiva, o mesmo autor ressalta que a ação docente é carregada de diversidades de saberes, que compõem um arcabouço de conhecimentos construídos para além da formação, os quais são imprescindíveis á ação docente. Para Bordenave e Pereira (2015) o processo para melhorar ensino, exige do professor a modificação de outros elementos além dos métodos, é necessária uma visão integral dos problemas do curso de forma a tecer estratégias para o ensino e a aprendizagem, visando formar alunos de atitude e habilidades de sua formação. Este trabalho objetivou-se analisar as estratégias de ensino utilizadas pelos professores formadores de cursos de Licenciatura em Química de Instituições públicas do Estado de Goiás. A metodologia caracterizou-se como qualitativa com abordagem descritiva e exploratória. Realizou-se uma busca no Site das Instituições, e SUAP (Sistema Unificado de Administração Pública). Foram localizados 124 planos de ensino do ano de 2020, planejados antes da pandemia do vírus *Sars Cov-2*, que compuseram o corpus deste estudo. Utilizou-se da análise de conteúdo, segundo as orientações de Bardin (2016), tendo como instrumento de coleta de dados o *software NVivo®* o qual auxiliounesta análise. Foram localizados planos de ensino de três Instituições distribuídas em 8 (oito) Campi. A análise dos planos foi dividida em duas categorias: i) Dimensão curricular; ii) Dimensão ensino. Em i) foram subcategorizados em perfil da disciplina, sendo: (estágio com 20 documentos; geral e específica, 55; pedagógica, 32; prática como componente curricular com 15, e projeto integrador ou de ensino com 2 (dois)); Em ii) foram categorizadas ementa; metodologia e objetivos. Preponderaram metodologias de ensino como aulas expositivas ou dialogadas; resolução de exercícios, listas ou questionários; seminários; estudo de texto; aula experimental em laboratório e relatórios. Metodologias como problematizações; estudo dirigido; produções audiovisuais; debates; aula de campo; foram pouco mencionados. Diante deste levantamento, percebe-se a necessidade de um planejamento sistêmico das aulas dos professores formadores, visando identificar possíveis falhas e incentivar a participação mais ativa do licenciando, bem como uma atitude mais científica e proativa, ou seja, formar futuros professores com capacidade de inovação de suas aulas.

Agradecimentos:

À Capes e ao IFG.

Referências

1. BARDIN, L. **Análise de Conteúdo**. São Paulo: Edições 70, 2016.
2. BORDENAVE, J. D.; PEREIRA, A. M.. **Estratégias de ensino-aprendizagem**. 33. ed. Petrópolis: Vozes, 2015.
3. TARDIF, M. **Saberes docentes e formação profissional**. 17. ed. Petrópolis: Vozes, 2018.

Formação de professores/as de química em espaço não formal: um debate sobre gênero, raça e sexualidade

Morgana A. Bastos¹(PG), Gustavo A. A. Faustino²(IC), Regina N. Vargas³(PG), Marta C. de Oliveira⁴(PG), Anna M. C. Benite⁵(PQ), Cláudio R. M. Benite⁶(PQ), gustavoaugusto531@gmail.com.

¹⁻⁶ Coletivo Ciata do Laboratório de Pesquisas em Educação Química e Inclusão (LPEQI/IQ/UFG)

Palavras-chave: gênero, raça, sexualidade, mulheres negras, espaço não formal de ensino, ensino de química

Na formação de professores/as de Química, os assuntos sobre gênero, sexualidade e as relações étnico-raciais são poucos discutidos (BENITE *et al*, 2018). Dessa forma, os espaços não formais de ensino apresentam-se como uma alternativa para contribuir na formação desses/as sujeitos/as. Esta é uma pesquisa participante que apresenta estudos de planejamento e desenvolvimento de uma Vivência Intercultural em Produção de Ciências realizada em uma ONG feminista negra do município de Goiânia, gravada em áudio e vídeo e transcrita, totalizando 296 turnos de discursos produzidos. Foram sujeitos dessa investigação: uma cientista negra das exatas convidada (PP), uma professora formadora (PQ-IQ, UFG), uma aluna de doutorado (PF1), duas alunas de mestrado (PF2 e PF3), quatro alunos/as de iniciação científica (PF 4-7), todos/as do IQ UFG e 31 participantes da ONG. Passamos a analisar os resultados.

Tabela 01. Debates sobre gênero, raça e sexualidade.

T	ID	DISCURSO
68	PP	É importante incluir mulheres na ciência, é importante incluir mulheres negras também.
75	PP	É o que é que faz com que eu me identifique com uma mulher?
76	A13	Quando tem que usar rosa porque é mulher.
79	A8	Que eu tenho que gostar de limpar a casa, tirar a poeira para tudo ficar limpinho.
113	PP	A ideia é de fazer o trocadilho de biscoito de gengibre que para gênero fica “genderbread” “imagem utilizada para explicar as diferenças entre identidade de gênero, expressão de gênero, sexo biológico e orientação sexual” (SALVADOR, 2017, p. 280).

As mulheres sempre foram excluídas do fazer científico e as mulheres negras, ainda mais (BENITE *et al*, 2018) pois estas são marcadas pela interseccionalidade de raça e gênero. Defendemos que para uma sociedade mais justa necessária é a divulgação e a visibilização dessas pesquisadoras inclusive para o desenvolvimento científico e tecnológico do país (turno **68**) (ROSA, 2018). A sociedade brasileira patriarcal ainda traz consigo designação de marcadores de gênero tais como as cores rosa e azul (turno **76**) e os papéis sociais de gênero das mulheres (turno **79**). Este resultado nos faz considerar que o debate de gênero e sexualidade ainda perpassa as concepções binárias e heteronormativas (SALVADOR, 2017). Por outro lado a química é a ciência da transformação, ou seja, a ciência da vida. Assim, falar das relações de gênero e sexualidade (turno **113**) na formação de professores/as de química passa também por uma formação política e comprometida com os/as sujeitos/as pertencentes a esta sociedade.

Agradecimentos

Ao Grupo de Mulheres Negras Dandara no Cerrado, Colégio Estadual Solon Amaral, CNPq e à UFG.

Referências

- Benite, A. M. C.; Bastos, M. A.; Vargas, R. N.; Fernandes, F. S.; Faustino, G. A. A. Cultura africana e afro-brasileira e o ensino de química: estudos sobre desigualdades de raça e gênero e a produção científica. *Educação em Revista*, 2018, v. 34, p. 1.
- Rosa, K. Science identity possibilities: a look into Blackness, masculinities, and economic power relations. *Cultural Studies Of Science Education*, 2018, v. 13, p. 1005.
- Salvador, T. F. Sexualidade e trabalho: diversidade sexual. *Boletim ESMPU*, 2017, v. 2, p. 279.

Harry Potter científico, um RPG para ensino de Química e Magia

Mariana F. Herculano^{1*} (IC), Márlon H. F. B. Soares¹ (PQ).
mahferreira.mf@gmail.com

¹LEQUAL – IQ – UFG – Campus Samambaia

Palavras-chave: RPG, Harry Potter, Ciência e Magia, Jogo pedagógico

O chapéu seletor: Abreviação de *Role Playing Game*, o RPG é definido como um jogo de interpretações de papéis, com participantes responsáveis por personagens que vivem determinada história. Esta, chamada de aventura, é contada por um mestre, o responsável por estabelecer o sistema de regras e o objetivo da narração e os participantes/jogadores, com a função de interpretar seus personagens, cumprindo desafios da aventura para dar continuidade a história interpretada, e por fim concluir o jogo (JACKSON, 1994). Cada RPG possui um sistema de regras próprio, adaptado ao contexto e objetivo da narração (ou aplicação do jogo) e é desse sistema de regras que se compreende o funcionamento do jogo, como um manual de instruções. (CAVALCANTI, 2007). Logo, uma atividade lúdica, equilibrada com a função educativa, um jogo pedagógico que pode ensinar conceitos de química.

O salgueiro lutador: O jogo foi elaborado e aplicado de forma contínua em duas turmas da disciplina de Didática para o curso de Licenciatura em Química. A aplicação foi filmada e gravada, e a partir da transcrição houve a análise a partir da categorização dos dados utilizando-se a Análise de Conteúdo.

A Floresta Proibida: Pela leitura das transcrições, foram determinadas cinco categorias de análise, e para este trabalho recortamos uma delas, a categoria: *discussão conceitual* (com o objetivo de avaliar a conexão entre o conceito abordado pelo aluno e o feitiço proposto). Podendo ser analisada no seguinte extrato:

“A3: Esse último feitiço, o wingardium leviosa, que faz objetos levitarem.
A1: Você altera a gravidade do ar e aí flutua, ou podemos condensar muito ar em uma região, para que a densidade seja maior que o objeto e ele poder conseguir flutuar (...)

Sem especificar conceitos, deixamos os alunos livres para tentarem interpretar o funcionamento da magia com algum conceito que tivesse melhor domínio, como por exemplo, entender a relação massa e volume para alterar a densidade.

O pomo de ouro: Entendendo a bruxaria como ação que tenta influenciar na transformação da matéria por meio de um princípio oculto, ao discutir feitiços de forma científica, podemos dizer que o princípio oculto é a química. Desse RPG, com uma narração de finalidade estabelecida (formar-se como bruxo químico), cumprimos tanto com o objetivo da pesquisa, aplicando o RPG como um jogo pedagógico, quanto com o objetivo da narração, validada pela construção de um pensamento sobre feitiço químico.

Agradecimentos:

UFG, LEQUAL, PROLICEN

Referências

- CAVALCANTI, E. L. D.; Role Playing Game E Ensino de Química; 1. ed. Curitiba: Appris, 2018.
JACKSON, S.; Gurus: módulo básico; São Paulo: Devir, 1994.
SOARES, M. H. F. B.; Jogos e Atividades Lúdicas para o Ensino de Química; 2º edição - Goiânia: Kelps, 2013.

Leituras de Inscrições no Ensino Superior de Química

Mikeas Silva de Lima¹ (PG), Henrique Meisegeier Larine² (IC), Salete Linhares Queiroz³ (PQ). salete@iqsc.usp.br

^{1,2,3}Instituto de Química de São Carlos

Palavras-chave: inscrições, ensino de química, leitura de inscrições.

Na perspectiva de Lator e Woolgar¹, as representações visuais materiais, tais como diagramas, gráficos, fotografias, esquemas etc., que são inerentemente elaboradas para retratar objetos e fenômenos estudados pela ciência são chamadas de inscrições. No entanto, diversos alunos apresentam dificuldades no uso e na interpretação de inscrições. Nessa perspectiva, o objetivo deste trabalho é investigar como uma sequência didática (SD) pautada na realização de exposições orais acadêmicas (EOA) fomenta leituras adequadas de inscrições e quais os fatores que influenciam essas leituras. A SD foi aplicada em uma disciplina de comunicação científica, oferecida a graduandos em Química, e inclui as seguintes etapas: formação de grupos de alunos, estudo acerca da produção dos gêneros EOA, produção de uma EOA preliminar e produção de uma EOA final. Todas as etapas estavam baseadas em um único artigo original de pesquisa por grupo, extraído da revista Química Nova. Três EOA foram selecionadas para análise.

A leitura competente foi a mais presente nas EOA analisadas, que é a mais adequada ao contexto do gênero textual produzido. Segundo Roth², essa leitura ocorre quando o aluno possui pouca familiaridade com o tipo de inscrição e o que ela representa (seu referente), de forma que a leitura envolve uma etapa de construção da dinâmica interna da inscrição, e uma etapa posterior de entendimento do que está sendo representado. Leituras transparentes ocorrem quando o tipo de inscrição e o seu referente é bastante familiar ao aluno, de forma que ele ultrapassa o entendimento da inscrição em si, para entendimento e visualização direta do fenômeno que está sendo representado². Essa leitura se deu em momentos pontuais, influenciadas, ou pela exibição de várias inscrições simultaneamente, que desfavorece a atenção em aspectos específicos da inscrição, ou pela familiaridade do aluno com a inscrição adquirida ao longo das atividades realizadas na disciplina.

Por fim a leitura problemática é aquela advinda também da falta de familiaridade com o tipo de inscrição e o seu referente, no entanto, o aluno se detém na estruturação da inscrição e não consegue avançar para o entendimento do fenômeno representado. Foi possível identificar apenas uma leitura problemática. O presente trabalho contribui para o delineamento de ações educativas que buscam fomentar o uso adequado de inscrições no ensino de ciências, assim como com aportes teóricos para a inclusão dessas discussões nos cursos de formação docente.

Agradecimentos

À FAPESP (2018/23809-3; 2018/23819-9) e ao CNPq (421940/2018-2).

Referências

1. LATOUR, B.; WOOLGAR, S. **A vida de laboratório: a produção dos fatos científicos**. Rio de Janeiro: Relume Dumará, 1997. 310 p.
2. ROTH, W. M. Reading graphs: Contributions to an integrative concept of literacy. **Journal of Curriculum Studies**, v. 34, n. 1, p. 1-24, 2002.

O EMPREGO DA EQUOTERAPIA NO TRATAMENTO DO TRANSTORNO DO DÉFICIT DE ATENÇÃO E HIPERATIVIDADE (TDAH)

¹Paulo Henrique Santos S*; ²Ilmo Correia S

Discente do Curso de Licenciatura em Química¹ (IC) do Instituto Federal Goiano-Campus Ceres, email: paulo_henrique20@outlook.com

Docente do Instituto Federal Goiano-Campus Ceres², email: ilmo.correia@ifgoiano.edu.br

Palavra-chave: desenvolvimento, equoterapia, transtorno do déficit de atenção/hiperatividade (TDAH).

INTRODUÇÃO. Nos dias atuais uma das grandes causas que as escolas vêm enfrentando é a gerência de embates oriundos dos alunos com Transtornos de Déficit de Atenção/Hiperatividade (TDAH). Percebe-se que uma das grandes consequências do TDAH é o insucesso escolar, onde esse insucesso atinge uma grande parte das crianças no Brasil, a ponto de ser um sério problema de saúde pública. Sabe-se que o TDAH influencia na vida da criança em torno de seu ambiente, seja acadêmico, social e interpessoal. Queixas de desatenção, impulsividade e agitação são as principais causas de encaminhamentos de crianças e adolescentes para serviços especializados de atendimento infanto-juvenil. Desta forma, entende-se por TDAH uma doença neuropsiquiátrica que resulta em distúrbios comportamentais, comumente diagnosticada na infância e que pode persistir até a vida adulta. Nestes indivíduos podem-se observar também perturbações motoras tais como dificuldades de equilíbrio, noção de espaço e tempo, esquema corporal. A Hiperatividade ou Transtorno de Déficit de Atenção e Hiperatividade (TDAH), é um dos diagnósticos que mais perturba a aprendizagem na infância (mas há grande existência de diagnósticos de pessoas adultas também) e com um alto índice de ocorrência na idade em período escolar. A maior queixa que se destaca é a desatenção, relacionada a uma excessiva agitação psicomotora e impetuosidade (COUTO,2010). **RESULTADOS E DISCUSSÕES.** Para que o tratamento seja eficaz é preciso que aja um modelo de profissionais que atuem de forma interdisciplinar, formado por Médicos, Fisioterapeutas, Psicólogos, Terapeutas Ocupacionais, Fonoaudiólogos, Educadores Físicos e profissionais de Equitação, onde possa trazer ao praticante segurança, alta estima e capacidade de comando, para que possa ser ampliado métodos apropriados a cada perfil clínico de cada praticante. No atendimento da equoterapia deve ser trabalhado tendo em vista cada necessidade do praticante, criando objetivos a serem alcançados para uma área estimulada. Os benefícios neurofisiológicos trabalhado com o cavalo é uma pratica funcional para crianças agitadas, tendo uma concentração e atenção para que sejam capazes de manter sobre o cavalo, para que esses profissionais tenha uma ampla visão no desenvolvimento da criança. **CONCLUSÃO.** Os estudos indicam que as intervenções do TDAH influenciam positivamente na motricidade fina, no equilíbrio, no esquema corporal e na organização temporal. Dessa forma, percebe-se que a equoterapia é um método eficaz para o tratamento de crianças com TDAH, destacando-se a relevância de serem realizados mais estudos a respeito desta temática, possibilitando novos avanços de tratamento através do animal e tornando cada vez mais importante para a educação, saúde, bem-estar e pessoal, tornando-se acessível à melhora do praticante e conseqüentemente a melhora da autoestima e a qualidade de vida ao meio em que vive. **REFERÊNCIAS**

ANOE BRASIL (Associação Nacional de Equoterapia). O que é equoterapia. Noticiário Tortuga. Edição especial equídeos. Ano 53. p. 58-59, 2007.

ASSOCIAÇÃO NACIONAL DE EQUOTERAPIA. Curso básico de equoterapia. Brasília, DF, 2006-2010.

BARKLEY, R. A. C. Transtorno de déficit de atenção/ hiperatividade: manual para diagnóstico e tratamento. Ed. 3. Porto Alegre, RS: Artmed, 2008.

COUTO, T. S. M. J. M.R.; GAMES, C. R. A. Aspectos neurobiológicos do transtorno do déficit de atenção e hiperatividade (TDAH): Uma revisão. Cienc. Cog, 15, p. 51-241, 2010.

O ENSINO DE QUÍMICA NA PERSPECTIVA DA EDUCAÇÃO AMBIENTAL ATRAVÉS DE MAPAS CONCEITUAIS.

Maria Paula P. R. P. Castro¹ (PG) mpprcastro@gmail.com, Janaína S. Stiz^{2*} (IC) jana.stiz21@gmail.com.

¹universidade Cruzeiro do Sul/SP, ²universidade Federal do Mato Grosso/MT.

Palavras-chave: Ensino de Química, Educação Ambiental, Mapa Conceitual.

O movimento em prol do meio Ambiente ganhou força na década de 70 e, gradativamente se expandiu pelo mundo dando origem a Educação Ambiental¹. Nos chama a atenção para a importância da preservação ambiental visto que a natureza vem sendo explorada de forma desenfreada, como se os recursos fossem infinitos, acarretando dentre outros, incalculáveis problemas ambientais. Neste aspecto a educação ambiental é uma aliada das instituições, pois visa propiciar equilíbrio entre o homem e o seu meio, se configura como instrumento para a transformação, e para compor a relação entre meio ambiente e educação. É evidente a necessidade de interação entre o cotidiano dos estudantes e a ciência em busca de uma aprendizagem que tenha sentido para os discentes. Essa aprendizagem é defendida por Ausubel² como “aprendizagem significativa” que aborda como as novas informações, conteúdos, se relacionam com os conhecimentos específicos de cada indivíduo, ou seja, sua estrutura cognitiva³. O objetivo desse trabalho foi estudar sobre as questões ambientais contemporânea tais como: aquecimento global, agrotóxicos, chuva ácida, efeito estufa e lixo eletrônico em uma escola pública de Cuiabá/MT através da química e contribuir para a sensibilização dos estudantes quanto ao cuidado com nossas reservas ambientais para preservação da vida. O método de pesquisa empregado no trabalho foi a pesquisa Bibliográfica. Neste sentido foram realizadas pesquisas, discussões em grupos e a culminância do trabalho foram à elaboração de Mapas Conceituais. Os mapas conceituais são instrumentos gráficos que podem facilitar a aprendizagem e, transformar o modo de ensinar, avaliar e de aprender. Concluímos que o trabalho foi de extrema relevância para o ensino de Química, e, principalmente para Educação Ambiental, pois houve um despertar dos estudantes para a importância do cuidado com as riquezas ambientais do planeta e da região.

Referências

1. MIYAZAWA, G. C. M. C., Projeto de Extensão “Educação Ambiental na Prática”, 2015, p. 892.
2. MOREIRA, M. A., A Teoria Da Aprendizagem Significativa, 2006, p.13.
3. MOREIRA, M. A., O que é afinal Aprendizagem Significativa?, 2010, p.2.

Os Projetos Pedagógicos dos Cursos de Licenciatura em Química: problemas na publicização dos documentos

Yasmine Fernandes Oliveira¹ (IC)*, Nyuara Araújo da Silva Mesquita¹ (PQ)

yasminefernandes2012@gmail.com.

¹Laboratório de Educação Química e Atividades Lúdicas - IQ - UFG.

Palavras-chave: Projeto Político Pedagógico, Licenciatura em Química, Instituições de Ensino Superior.

Os preceitos básicos que fundamentam e direcionam os cursos de graduação oferecidos pelas instituições de ensino podem ser encontrados nos Projetos Pedagógicos de Curso (PPC), ao estudar e analisar os objetivos expressos no do PPC de um curso é possível identificar o perfil pretendido para o profissional a ser formado. Segundo Goodson (1997) *apud* Lopes (2007, p. 80)¹, este documento é o “testemunho público e visível das racionalidades escolhidas e da retórica legitimadora das práticas escolares”. Dessa forma, é um documento público e as Instituições de Ensino Superior (IES) devem disponibiliza-los pra consultas. Entretanto, isto não acontece, pois quando há a necessidade de acesso aos documentos, muitos não se encontram disponíveis para pesquisa. No caso específico dos cursos de Licenciatura em Química, na Plataforma do e-MEC² são cadastrados atualmente 378 cursos de Licenciatura em Química, sendo 263 ofertados por instituições públicas. A partir de um levantamento realizado em páginas das IES das regiões Norte e Nordeste (Tabelas 1 e 2) buscou-se os PPC destas instituições que ofertam o curso de licenciatura em química na modalidade presencial.

Tabela 1. Levantamento realizado na região Norte.

Região Norte		
Estados	Quantidade de cursos ofertados pelas IES	PPC encontrados
Acre	2	1
Amazonas	8	3
Amapá	3	2
Pará	7	6
Rondônia	3	3
Roraima	2	2
Tocantins	2	2
TOTAL	27	20

Tabela 2. Levantamento realizado na região Nordeste.

Região Nordeste		
Estados	Quantidade de cursos ofertados pelas IES	PPC encontrados
Alagoas	6	4
Bahia	16	6
Ceará	18	11
Maranhão	10	4
Paraíba	7	4
Pernambuco	13	9
Piauí	11	6
Rio Grande do Norte	6	5
Sergipe	4	3
TOTAL	91	52

Fonte: Autora

A partir dos dados obtidos, a disponibilização destes documentos, que deveriam ser públicos, não é realizada de maneira adequada. Na Região Norte 74% dos documentos são publicizados e, na Região Nordeste, existem apenas 57,2 % dos PPC disponíveis nas páginas oficiais dos cursos presenciais. Dessa forma, o acesso às propostas pedagógicas é dificultado, impossibilitando pesquisas sobre os PPC e o diálogo entre IES. As pesquisas a partir desses documentos podem propiciar melhorias nos cursos vislumbrando alterações e adequações de propostas considerando-se aspectos positivos que poderiam ser socializados por meio dos PPC.

Agradecimentos a UFG.

Referências

¹LOPES, A. C. Currículo e epistemologia. Ijuí: Editora Unijuí, 2007.

²<https://emec.mec.gov.br/>

Saberes tradicionais e a construção de uma farmácia popular

Brunno S. Souza (IC), Gabriela F. Matos (PG), Josellane S. Pires (IC), Hevellyn G. D. Barbosa (IC) e Anna M. C. Benite (PQ). @ *Brunnossilva02@gmail.com*

Laboratório de Pesquisas em Educação Química e Inclusão (LPEQI), Núcleo de Pesquisa e Ensino de Ciências (NUPEC), Instituto de Química (IQ), Universidade Federal de Goiás (UFG)

Palavras-chave: farmácia popular, saberes tradicionais.

O conhecimento científico é construído e acordado dentro da comunidade científica, sendo ao mesmo tempo, simbólico por natureza e socialmente negociado. Os objetos da ciência não são os fenômenos da natureza, mas construções desenvolvidas pela comunidade científica para interpretar-la.¹ Já os saberes tradicionais, também são uma forma de ler a natureza, porém não são conhecimento científico, mas com ele dialogam. Assim, objetivamos desenvolver uma mini-farmácia utilizando estudos da bioatividade das plantas do cerrado como estratégia de diálogo entre conhecimento científico e conhecimento tradicional em dois terreiros de religião de matriz africana, especificamente o Candomblé e Umbanda, onde foram entrevistada uma ialorixa e um babalorixá, para se conhecer o interesse específico de cada terreiro. No Quadro 1, apresentamos alguns resultados já produzidos na pesquisa. Os participantes da pesquisa, nesse extrato, são denominados P1: uma ialorixá; IC: aluna/o de iniciação científica. Cada fala corresponde a um turno representado no texto por **T** que são enumerados de acordo com a sequência das falas na pesquisa.

Quadro 1: sobre conhecimento popular.

T.18-P1:	dessa aqui ó, ela também cresce sozinha como mastruz, vermífugo fazer o que a gente conhece de emplastro, já ouviu falar nisso?
T.19- IC1:	não
T.20- P1:	emplastro que o povo antigo fala é coisa que você põe em cima da pele para que ela absorva. [...]. Então tipo, você tem uma artrite que não é um machucado exposto; aí você põe em cima passa a faixa e segura.
T. 55-IC2:	Então, a gente veio aqui com os nossos conhecimentos de químicos, biomédicos e biólogos, para poder contribuir com vocês.[...] O que vocês acham?
T. 91- P1:	Mas o conhecimento de fazer a pomada vocês vão me ensinar a fazer?
T. 92-IC2:	Sim, a gente vai ensinar

O participante (P1) traz consigo conhecimentos adquiridos ao longo das gerações, por exemplo em **T.20**, na definição de emplastro. Esse termo se refere a uma base adesiva que contém um princípio ativo, e essa base deve ser colocada em contato com a pele para atuar como protetor ou agente queratolítico.² Em **T.55** e **T.92** IC2 faz alusões aos propósitos da universidade para com as comunidades, nesse caso os conhecimentos científicos na produção de pomada, gel e tintura, por exemplo toxicidade, armazenamento e validade.^{2,3} Nossos resultados indicam que essa pode ser uma alternativa de estabelecimento de diálogo entre a universidade e uma determinada comunidade.

Agradecimentos

CAPES, CNPQ, FAPEG

Referências

¹Driver, R. Asoko, H. Leach, J. Mortimer, E. Scott, P. Construindo conhecimento científico na sala de aula. 1999, 31.

²<http://portal.anvisa.gov.br/documents/33836/2501339/Vocabul%C3%A1rio+Controlado/fd8fdf08-45dc-402a-8dcf-fbb3fd21ca75>. Acessado em 15/01/2020.

³http://portal.anvisa.gov.br/documents/33832/259456/Formulario_de_Fitoterapicos_da_Farmacopeia_Brasileira.pdf/c76283eb-29f6-4b15-8755-2073e5b4c5bf. Acessado em 29/01/2020.

Uma Análise da Linguagem Empregada no Ensino de Termoquímica em Livros Didáticos

Lucas R. Silva¹ (PQ), Ana C. A. F. Gontijo² (PQ), Carine A. Tales³ (PQ).

¹rijo_lucas@hotmail.com, ²carolineafg@hotmail.com, ³carineatales@gmail.com.

Palavras-chave: Linguagem; Livros Didáticos; Termoquímica.

Os livros de química são amplamente criticados por reproduzirem um ensino tradicionalmente conteudista, que dificulta o processo de ensino e de aprendizagem, pois promove uma visão distorcida do que é a ciência¹. A utilização de uma linguagem técnica dentro dos livros, que não procura envolver o aluno, mas sim transmitir fórmulas e conceitos, reflete uma realidade onde os alunos são preparados para realização de provas vestibulares, priorizando a reprodução do máximo de conhecimentos possíveis com maior eficiência². Por envolver aspectos matemáticos, a termoquímica muitas vezes é reduzida a um conjunto de fórmulas que são apresentadas aos alunos sem maiores explicações, todo o contexto que envolve aquele conteúdo é ignorado, assim o formalismo presente no ensino de termoquímica impede a visualização e a importância desse conteúdo. O objetivo deste trabalho é propor uma revisão bibliográfica, analisando e classificando trabalhos presentes em diferentes plataformas de ensino que abordem as dificuldades do ensino de Termoquímica, com ênfase na linguagem encontrada na literatura. Para o levantamento dos dados foram utilizadas diferentes bases de dados científicos como: Periódicos CAPES, Web of Science e Scielo. O período estipulado foi para os últimos 18 anos, o que corresponde aos anos de 2000 a 2018. Um total 40 trabalhos, dentre eles artigos e monografias, foram analisados, os quais propunham análises na linguagem utilizada em sala de aula, e naquela presentes nos livros didáticos. Os trabalhos foram classificados de duas formas, a primeira quanto ao conteúdo que tratavam, sendo eles: A Primeira Lei da Termodinâmica, A segunda Lei da Termodinâmica e a História da Ciência. A segunda forma de classificação foi quanto a abordagem didática e como ela se relacionava com o conteúdo e se o foco era a educação básica ou o ensino superior. Todos os trabalhos, chamaram a atenção para a necessidade de maior contextualização social e histórica, especialmente nos livros didáticos. A compreensão e o entendimento dos alunos, especialmente quanto interpretação de texto voltado para as ciências exatas, não é uma medida quantitativa e, portanto, não é fácil de mensurar. Mas é possível analisar a linguagem empregada nos livros e sua acessibilidade para os estudantes, buscando fazer com que aprendizagem do aluno seja significativa, portanto, é importante visar o ensino não apenas na quantidade de conteúdo ensinado, mas sim na qualidade e na significação que todos os conceitos apresentados podem ter para o aluno. A química como ciência exata necessita ser entendida em seus termos técnicos, mas isso não obriga o seu ensino por meio desses termos, uma vez que o ensino de química deve se pautar numa perspectiva que visa à compreensão dos alunos, contribuindo para a formação de cidadãos capazes de ter um pensamento crítico e exercer assim um papel atuante dentro da sociedade.

Referências

1. PORTO, P.A. História e filosofia da ciência no ensino de química... In: SANTOS, W.L.P.; MALDANER, O.A. (Orgs.). Ensino de química em foco. Ijuí: Unijuí, 2010. p. 159-180.
2. MÜHL, Eldon H. Habermas e a educação. Revista Educação & Sociedade. Campinas: 2011.

A QTAIM and DFT study of the performance of benzotriazole (BTAH) complex with copper in the electrocatalysis of the oxygen reduction reaction

Gabriel R. Martins¹ (PG), Leandro M. C. Pinto¹ (PQ).
gabrielrodriguesm@gmail.com

¹Institute of Chemistry, Federal University of Mato Grosso do Sul (UFMS), Campo Grande – MS.

Keywords: ORR, QTAIM, BTAH complexes, electrocatalysis.

In general, the oxygen reduction reaction (ORR) mechanism in fuel cells is not well known, and the extensive use of such devices is still limited by the lack of affordable and practical catalysts^{1,2}. Oxygen reduction is a sluggish cathodic reaction, which appears as one of the main reasons that make fuel cells ineffective for energy production³. Metal-organic complexes are an alternative to noble metal-based catalysts⁴. Despite many experimental studies showing the catalytic activity of complexes toward the ORR, only a few theoretical calculations are available in the literature⁵. The present work reports the findings of a quantum chemical study conducted in terms of density functional theory to analyze parameters, such as bond lengths and angles, binding energy and vibrational frequencies, of Cu(II)BTAH complex in both the isolated form and via Cu(II)BTAH interaction with O₂ (Figure 1), aiming at assessing the catalytic activity of the complex in ORR. The QTAIM and GAPT charges show copper as an electron acceptor and oxygen as an electron donor during adsorption. The results show that the Cu(II)BTAH-O₂ complex can be used as a reference system to illustrate the importance of a redox pair of Cu(II)/Cu(I) and BTAH in ORR.

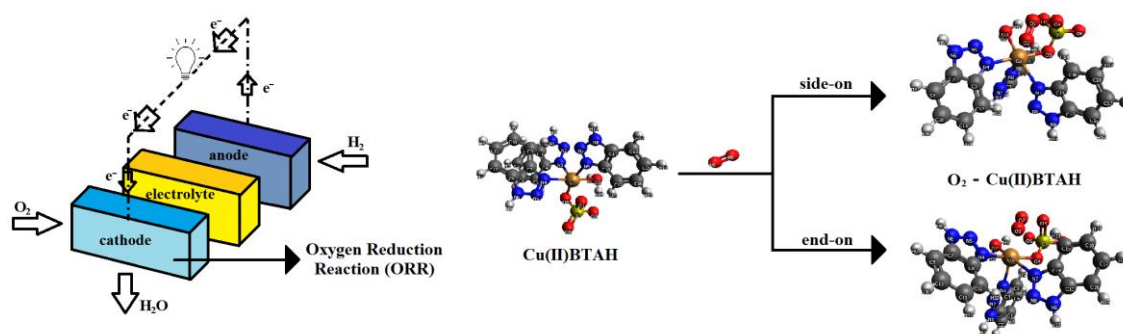


Figure 1 – Scheme of the interaction stage between Cu(II)BTAH and O₂ during ORR.

Acknowledgments

The authors would like to acknowledge UFMS.

References

1. Pinto, L. M. C., Maia, G., The Journal of Physical Chemistry C, 2015, 119, 8213.
2. Goduljan, A., Pinto, L. M. C., Juarez, F., Santos, E., Schmickler W., ChemPhysChem, 2016, 17, 500.
3. Keith, J. A., Jacob, T., Angewandte Chemie International Edition, 2010, 49, 9521.
4. Liu, G., Li, X., Lee, J. W., Popov, B. N., Catalysis Science & Technology, 2011, 1, 207.
5. Ignaczak, A., Nazmutdinov, R., Goduljan, A., Pinto, L. M. C., Juarez, F., Quaino, P., Santos, E., Schmickler, W., Nano Energy, 2016, 29, 362.

Análise de Componente Principal de propriedades de moléculas TKI's.

João E. M. Saraiva¹ (IC), Érica C. M. Nascimento¹ (PQ), José L. L. Alcantara¹ (IC), Luiz F. Moennich¹ (IC), Letícia A. Nascimento¹ (IC), João B. L. Martins¹ (PQ)*

¹Universidade de Brasília, Laboratório de Química Computacional, IQD, CP 4478, Brasília-DF, Brasil.

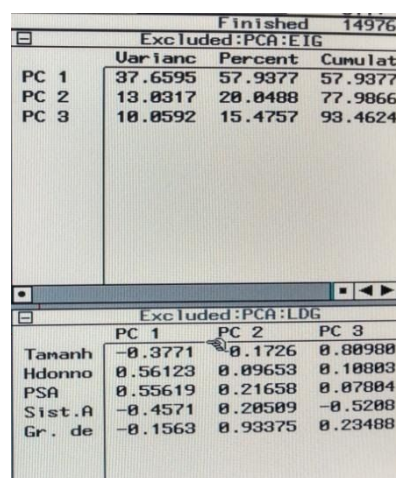
lopes@unb.br

Palavras-chave: TKI, Docking, PCA, Inibidores.

Os inibidores da proteína Tirosina Quinase BCR-ABL são utilizados para bloquear o acesso do substrato natural ATP ao sítio catalítico da proteína, fazendo assim que não ocorra a replicação da mesma. Atualmente, muitos dos fármacos utilizados para o tratamento da LMC (Leucemia Mieloide Crônica), são os mesmos utilizados para o tratamento de outros tipos de cânceres, sendo os principais o Imatinibe, Gefitinibe e o Afatinibe.³ Entretanto como ocorre um grande número de mutações nesta enzima, um fármaco pode perder sua eficácia no tratamento em estágios mais avançados de doenças que são ocasionadas quando estas proteínas se proliferam de maneira desordenada no meio intracelular.^{1,2}

Com o avanço do estudo computacional é possível estudar proteínas com modelos teóricos com relação ao seu potencial farmacológico. Utilizando os métodos semiempíricos AM1, PM3 e PM6 as propriedades eletrônicas e estruturais de 12 inibidores da tirosina quinase foram exploradas. Na busca de características eletrônicas e estruturais comuns, assim como determinar quais descritores são essenciais para correlacionar o processo inibitório, foi aplicado o método de análise multivariada de componentes principal (PCA).

Dentre as 25 propriedades estudadas, o hidrogênio doador, o PSA, o número de sistemas aromáticos e os graus de liberdade são os principais descritores. Pode-se destacar o hidrogênio doador como sendo a mais importante para a PC1, o grau de liberdade o principal para a PC2 com destaque de uma diferença muito grande para as demais, e PC3 foi encontrado o tamanho da molécula. Dentro da mesma foram encontrados os valores de 37,66 para a variância e 57,93 para a variância acumulada na PC1. Para a PC2 foram encontrados os valores de 13,03 e 77,98 para as mesmas características e na PC3 foram encontrados os valores de 10,05 e 93,46.



	Uarianc	Percent	Cumulat
PC 1	37.6595	57.9377	57.9377
PC 2	13.0317	20.0488	77.9866
PC 3	10.0592	15.4757	93.4624

	PC 1	PC 2	PC 3
Tamanh	-0.3771	0.1726	0.80980
Hdonno	0.56123	0.09653	0.10883
PSA	0.55619	0.21658	0.07804
Sist.A	-0.4571	0.20509	-0.5208
Gr. de	-0.1563	0.93375	0.23488

Agradecimentos: CNPq, UnB, PROIC-UnB, LQC.

Referências

1. Lopes, N. R. e Abreu, M T. C. L.. Inibidores de tirosino quinase na leucemia mielóide crônica. *Rev. Bras. Hematol. Hemoter.* 2009, vol.31, n.6, pp.449-453. Epub Dec 11, 2009.
2. Patrick, G. L., *An Introduction to Medicinal Chemistry*, 3^a Ed, Oxford, 2005.
3. 10.1200/JCO.2012.44.2806 *Journal of Clinical Oncology* 31, no. 27 (September 20, 2013) 3327-3334.

Análise dos Orbitais de Fronteiras de TKI's

José L. L. Alcântara¹ (IC), Erica C. M. Nascimento¹ (PQ), Luiz F. M. A. Benico (IC), Letícia de A. A. Nascimento¹ (IC), João E. M. Saraiva¹ (IC), João B. L. Martins¹ (PQ)*
 lenartlucena22@gmail.com

¹Universidade de Brasília, Laboratório de Química Computacional, IQD, CP 4478, Brasília-DF, Brasil.

Palavras-chave: TKI's, Leucemia e Orbitais de Fronteira

O câncer é um dos principais fatores de mortalidade no mundo, responsável por cerca de 30% das mortes. Dentre os tipos de câncer está inserido as Leucemias (10^o com 321 mil/ano), estes por sua vez, estão subdivididos em: Linfóide e Mieloide crônica ou aguda. A Leucemia Mieloide Crônica (LMC), alvo deste trabalho, acometeu no ano de 2016 cerca de 10.070 pessoas no Brasil¹.

Como forma de tratamento convencional é ofertado o transplante de medula óssea e fármacos inibidores da proteína tirosina quinase (TKI's). A citopatologia envolve a mutação do cromossomo 22 e 9 pela translocação recíproca dos genes BCR e ABL formando uma proteína tirosina quinase (TK) quimérica com alta atividade metabólica. Esta desencadeia a proliferação descontrolada, e o bloqueio da apoptose, por consequência, uma alta concentração de células mielóides imaturas no sangue periférico. Conforme a região em que ocorre a translocação cromossômica e do novo fenótipo criado, pode ocasionar a resistência a certos TKI's sendo este o desafio para o desenvolvimento de novos fármacos TKI's².

Para melhor entendimento das características da estrutura eletrônica de TKI's, foi realizada a análise sistemática dos orbitais de fronteira HOMO, LUMO, e os orbitais mais internos HOMO-1 ao HOMO-4, e os mais externos LUMO+1 a LUMO+4, além do Gap para 12 inibidores da TK. Os valores da energia de cada orbital foi obtido utilizando os métodos semiempíricos AM1, PM3 e PM6 por meio do software Gaussian09.

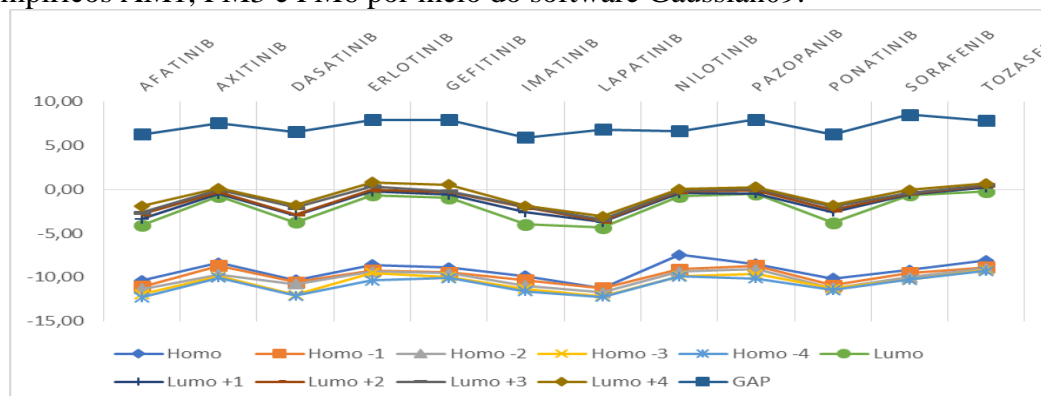


Figura 1. Perfil de Energia dos orbitais de fronteira (eV) de TKIs / AM1.

Com os dados obtidos, foi possível perceber que os TKI's apresentam energia dos orbitais e Gap similares, o que pode explicar a afinidade comum pela tirosina quinase e justificar a aplicação dos mesmos nos demais tipos de câncer com ênfase na LMC, além dos já usados. Faz-se necessário estudo da interação dos TKI's na forma mutada, além da selvagem.

Agradecimentos: CNPq, UnB, PROIC-UnB, LQC.

Referências

1. Azevedo, L. D. Bastos, M. M. Oliveira, A. P. Boechata B. Sínteses e propriedades de fármacos inibidores da tirosina quinase bcr-abl, utilizados no tratamento da leucemia mieloide crônica, **Quim. Nova**, 2017, 40, 791.
2. Bollmann, P. W. Giglio A. Leucemia mieloide crônica: passado, presente, futuro, **Revendo Ciências Básicas**, 2011, 9, 236.

Caracterização eletroquímica de filmes de Poli(3-metiltiofeno) e blendas de Poli(3-metiltiofeno)/PS dopados com grafeno.

Rayssa de S. Lopes¹ (PG), Maria Luiza L. S. Silva¹ (PG), Gildiberto M. Oliveira (PQ)¹, Tatiane M. Arantes¹ (PQ), Fernando H. Cristovan¹ (PQ).
tmarantes@yahoo.com.br

¹Universidade Federal de Jataí- Unidade Acadêmica de Ciência Exatas.

Palavras-chave: Polímeros condutores, Eletroquímica, Politiofenos, Blendas.

Dentre os polímeros condutores uma classe que se destaca é a dos politiofenos que apresentam alta absorção de luz na região do ultravioleta-visível, alta cristalinidade e estabilidade. Tendo como aplicações a construção de dispositivos optoeletrônicos como diodos emissores de luz, capacitores, baterias recarregáveis, sensores, entre outras [1]. No entanto, os politiofenos apresentam baixa processabilidade e insolubilidade em solventes orgânicos, além de possuir também baixa resistência mecânica [2]. Uma alternativa para melhorar as propriedades mecânicas é a produção de blendas do polímero condutor com um polímero termoplástico, como o poliestireno (PS). Possibilitando combinar as propriedades mecânicas dos polímeros isolantes com as propriedades elétricas dos polímeros condutores. Outro material inovador que vem sendo utilizado para este fim é o grafeno, que além de promover melhorias mecânicas também é condutor. Neste trabalho, foram preparadas blendas de poli(3-metiltiofeno)-grafeno/poliestireno, a síntese do P3MT foi feita *in situ* na presença de PS, utilizando método de Sugimoto adaptado. Foram realizadas as caracterizações eletroquímicas tanto do P3MT puro quanto da blenda, para tanto, foi preparado um eletrodo de pasta de carbono contendo o P3MT e outro eletrodo de pasta de carbono recoberto com a blenda de P3MT-Grafeno/OS, como eletrodo de trabalho, estudou-se o comportamento eletroquímico dos filmes de politiofenos e utilizando o método de voltametria cíclica (-0,1 a 1 V) em solução do par redox de ferricianeto e ferrocianeto de potássio (0,05 mol.L⁻¹) utilizando como eletrodo de referência de Ag/AgCl e um fio de Pt como contra eletrodo em diferentes velocidades de varreduras. Os resultados obtidos confirmaram a reversibilidade do processo redox Fe³⁺/Fe²⁺, e em relação a corrente de pico anódico tanto para o politiofeno quanto para a blenda. Verificou-se que o aumento da velocidade de varredura influenciava no aumento da corrente de pico anódica (I_{pa}) e no aumento da diferença entre o potencial de pico anódico-catódico (ΔE). Verificou-se também que a amostra de politiofeno pura apresentou um maior ΔE e I_{pa} em relação a blenda de P3MT-Grafeno/PS, indicando que nas blendas a eletroatividade do politiofeno é mantida mesmo após a formação da blenda. Demonstrando que os filmes das blendas de P3MT-Grafeno/PS sobre o eletrodo de pasta de carbono são promissores candidatos para a construção de sensores eletroanalíticos.

Agradecimentos: CAPES.

Referências:

1. DAKSHAYINI, B.S.; REDDY, Kakarla. R, *et al.* Microchemical Journal, Junho 2019, v. 147, p. 7-24.
2. CHAN, H. S. O.; NG, S. C. Synthesis, *Progress in Polymer Science*, 1998, v. 23, n. 7, p. 1167-1231.

Desenvolvimento De Um Veículo Baseado Em Amido Solúvel Poroso Para Amorfização Do Fármaco Efavirenz

Arturo B. L. Véliz¹ (PG), Karyne C. de Souza¹(PQ), Jackson A. L. C. Resende¹(PQ).

¹Instituto de Ciências Exatas e da Terra, Campus Universitário do Araguaia, Universidade Federal do Mato Grosso, Barra do Garças, Brasil.

Palavras-chave: amido poroso, amorfo, efavirenz

Na última década, tem sido relatados a proposição do uso de vários produtos de amido, incluindo espumas de amido macrocelular para aumentar a taxa de dissolução de medicamentos pouco solúveis em água[1], espuma de amido poroso biodegradável (BPSF) como veículo para melhorar a dissolução e melhorar a biodisponibilidade oral da lovastatina [2] e o uso de amido para melhorar a solubilidade da carbamazepina [3] .

O trabalho descreve o desenvolvimento de um tipo de amido solúvel poroso (ASP) como veículo para amorfização de efavirenz (EFV). O ASP foi preparado pelo método de troca de solvente. O EFV foi carregado por mistura física e evaporação de imersão do solvente no ASP que proporcionou uma matriz hidrofílica estável com uma estrutura porosa. As propriedades de estado sólido das amostras foram caracterizadas por MEV, espectroscopia de infravermelho por transformada de Fourier (FTIR), calorimetria exploratória diferencial (DSC) e difração de raios X (DRX). O espectro FTIR do sistema ASP/EFV obtido apresentou bandas características atribuídas ao efavirenz em 2259 cm⁻¹, confirmando a presença de EFV na matriz polimérica do ASP. As micrografias por MEV mostraram que o EFV absorvido no ASP estava parcialmente presente como microcristais, parcialmente na forma cristalina distribuída na superfície do ASP e parcialmente na forma amorfa distribuída nos poros do ASP. Os resultados por DSC mostraram o comportamento térmico do amido poroso carregado com efavirenz, em que é evidenciado um pico endotérmico correspondente à temperatura de gelatinização do amido poroso. Em algumas formulações o pico endotérmico do EFV desapareceu, o que pode ser atribuído ao seu caráter amorfo. Esse fato foi confirmado com os padrões de difração de raios X onde não se observam picos cristalinos do efavirenz, indicando que o fármaco nessas proporções está bem disperso na matriz polimérica.

Agradecimentos

CAPES, CNPq e UFMT

Referências

1. Zhao, Y. *et al.*. Pharmaceutical development and technology, 2016, 21, 749.
2. Wu, C., *et al.* International journal of pharmaceutics, 2011, 403, 162.
3. Ali, M. T., *et al.* AAPS PharmSciTech, 2013, 14, 919.

Docking Molecular de TKIs

Nome(s) do(s) autor(es): Luiz Felipe M. A. Benício¹ (IC), João E. Saraiva¹ (IC), José L. L. Alcantara¹ (IC), Luiz F. Moennich¹ (IC), Erica Cristina Moreno Nascimento¹, João B. L. Martins¹.

¹Universidade de Brasília, Laboratório de Química Computacional, IQD, CP 4478, Brasília-DF, Brasil.

lopes@unb.br

Palavras-chave: Tyrosine Kinase, Inhibitors, Docking,

Leucemias com Cromossomo Philadelphia (Ph+) são expressas devido a fusão oncogênica gerando a enzima tirosina quinase BCR-ABL, o que induz um comportamento antiapoptótico e de sinalização proliferativa. Esses são agrupados no grupo de Leucemias mieloides crônicas (LMC)¹ e no subgrupo de leucemias linfoblásticas. A LMC é tratada com grupo de fármacos inibidores da proteína tirosina quinase BCR-ABL, sendo seu representante o Imatinibe (Gleevec, STI 571), que é reconhecidamente usado para terapia com alvo direcionado². Porém, também é reconhecido a resistência para o Imatinibe devido a outras mutações na proteína BCR-ABL entra ela a mutação T315I³. Essas mutações são tratadas com inibidores de segunda geração da enzima BCR-ABL como o Nilotinibe (Tasigna, AMN107)⁴. Sendo assim, se faz necessário o desenho de moléculas com maior potencial e menor efeitos adversos para a quimioterapia com alvo direcionado.

Realizamos o estudo da interação da proteína BCR-ABL, por meio de docking molecular, na sua conformação oncológica selvagem, 3QRK; e sua conformação oncológica com mutação, 3QRJ(T35I); Foram estudados os inibidores utilizados para o tratamento da LMC; e adicionamos inibidores usados em tratamento de outros tipos de câncer: Axitinibe, Erlotinibe, Gefitinibe, Lapatinibe, Pazopanibe, Ponatinibe, Sorafenibe e Tozasertibe para avaliarmos qualitativa e quantitativamente a interações destes inibidores com seu alvo terapêutico. Comparamos os scores obtidos, tendo como referência máxima inibidor DP-987, com os valores de IC50, e também as conformações mais prováveis com valores de score mais altos obtidos. O estudo de Docking foi realizado com o programa AutoDock4 e o automatizador VsLab.

Nossos resultados dividem os inibidores em grupos conforme a sua utilização sendo categorizados em: Grupo A–E conforme suas características. O score alto demonstrado para o inibidor Ponatinibe relaciona uma posição similar com o encontrado na cristalização reproduzida com o inibidor DP-987, demonstrando alta afinidade pela proteína. Nossos resultados demonstram score alto para os inibidores do grupo A como esperado, com ressalvas para o score alto para Lapatinibe, Sorafenibe, Axitinibe, que são possíveis candidatos à aplicação como inibidores da BCR-ABL.

Agradecimentos: CNPq, UnB, PROIC-UnB, LQC.

Referências

1. Sawyers CL (1999) N Engl J Med 340:1330-1340.
2. Druker BJ (2004) AdvCancer Res 91: 1-30.
3. Druker BJ (2006) N Engl J Med 354: 2594-2596.
4. Weisberg E, et al. (2005) Cancer Cell 7: 129-141.

Efeito de modelador orgânico na síntese de $Ce_{0,8}Zr_{0,2}O_2$ nanoestruturado para oxidação do material particulado de diesel

Pablo T. A. Campos*¹ (IC), João P. V. Lima¹ (PQ), José A. Dias¹ (PQ), Sílvia C. L. Dias¹ (PQ).

1., Universidade de Brasília, Instituto de Química, Laboratório de Catálise (LabCat), 70904-970, Brasília-DF . *pablo.teles1998@gmail.com

Palavras-chave: Óxido misto de cério-zircônio, nanoestrutura, material particulado.

A síntese de materiais cristalinos nanoestruturado é resultado de um equilíbrio entre processos cinéticos e termodinâmicos estabelecidos durante o crescimento das partículas. Dessa forma, podemos desenhar um material com planos cristalinos de maior atividade. A utilização de modeladores orgânicos, usualmente ácidos carboxílicos, se faz necessário para conseguir nivelar os principais planos e assim definir como o material se comportará cataliticamente [1]. O óxido misto de cério-zircônio é um importante material quando se trata de catálise heterogênea visando oxidação de material particulado do diesel, entretanto é um desafio correlacionar síntese material e atividade catalítica. Nesse trabalho utilizamos uma síntese que nos leva a uma morfologia nanotubo dos óxidos mistos, onde existe a exibição preferencial dos planos (110) e (100) [1]. A síntese utilizada trata-se do método hidrotérmico, visando à formação de nanotubos. Foi utilizado como orientador orgânico citrato de amônio dibásico, a síntese convencional utiliza 0,82 gramas de cloreto de cério e 0,17 g de cloreto de zircônio e 0,96 g de modelador, para obter $Ce_{0,8}Zr_{0,2}O_2$ -NTs (CZ-NTs), e também utilizamos o dobro de concentração do modelador para obter CZ-NRs-2x. O material obtido foi calcinado a 500 °C por 4 horas. A caracterização estrutural foi realizada por difração de raios X (DRX), microscopia eletrônica de transmissão (MET) para a determinação da morfologia do material (Fig. 1a). O teste catalítico foi realizado por temperatura programada de oxidação acoplada a espectrometria de massa, TPO-MS, os principais sinais a serem analisados pelo MS foram: 18 = H₂O, 28 = CO, 32=O₂ e 44 = CO₂ (Fig. 1c). A conversão de material particulado para CO₂, é obtido a partir da integração da curva do sinal do MS=44 (MS-INT), percebemos que o material contendo o dobro de orientador orgânico, CZ-NTs-2x, possui menor temperatura de oxidação.

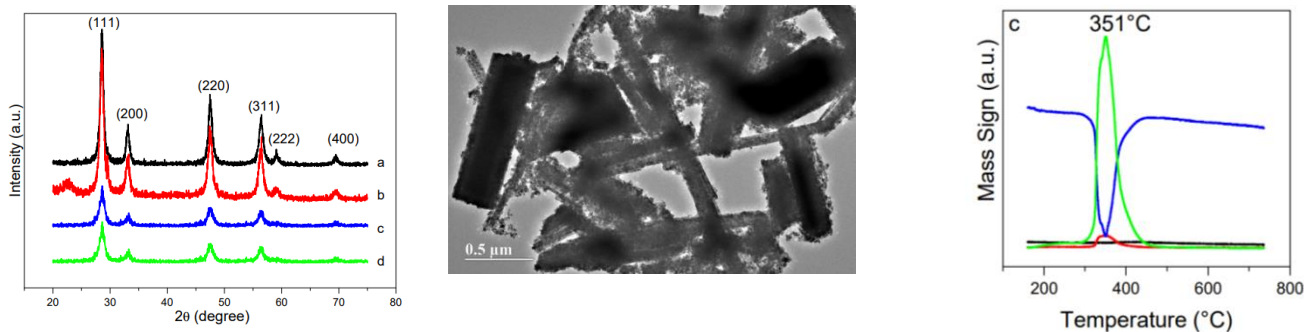


Figura 1: **a)** DRX a. CZ-NTs e b. CeO_2 -NTs-2x; **b.** TEM do CZ-NRs-2x e **c.** TPO/MS do CZ-NRs-2x (linha azul – m/e = 32 (O₂), linha verde – m/e = (CO₂), linha vermelha – m/e = 28 (CO) e linha preta – m/e = 18 (H₂O).

Referências

[1] Alessandro Trovarelli and Jordi Llorca. ACS Catalysis, 2017, 7(7):4716–4735.

Estudo da estabilidade oxidativa do óleo da amêndoa da macaúba e dos seus derivados epóxido e polioliol para uso como biolubrificantes

Tayane A. M. Serafim¹ (IC), Rodolfo A. Breves¹ (PG), Roseany V. V. Lopes² (PQ), Maria José A. Sales¹ (PQ), *tayserafim@hotmail.com*

¹Laboratório de Pesquisa em Polímeros e Nanomateriais (LabPolN), Instituto de Química, Universidade de Brasília, Campus Darcy Ribeiro, Brasília, Brasil. ²Faculdade do Gama, Universidade de Brasília, Brasília, Brasil.

Palavras-chave: óleo vegetal, macaúba, biolubrificante, epóxido, polioliol.

Um lubrificante é constituído por um óleo base e alguns aditivos. O óleo base mais utilizado atualmente em lubrificantes é derivado do petróleo que, apesar de suas propriedades vantajosas, provoca grandes acidentes ambientais, toxicidade e dependência de um material não renovável. Daí o interesse por lubrificantes originados de óleos vegetais. No entanto, eles possuem baixa resistência à oxidação, devido à presença de insaturações em suas cadeias carbônicas. Para minimizar esta desvantagem, foi escolhido o óleo da amêndoa da macaúba (*Acrocomia aculeata*) (OAM), pois os seus ácidos graxos principais são o ácido láurico, que é saturado, e o ácido oléico, que tem apenas uma insaturação e representa um pouco mais de 20% da sua composição.¹

Portanto, é feita a modificação química da estrutura do OAM, com o objetivo de aumentar a sua resistência à oxidação e permitir que ele seja utilizado como biolubrificante. O método de modificação do OAM consiste na epoxidação das insaturações por perácido, gerado *in situ*, pela reação do H₂O₂ com o ácido fórmico e, posteriormente, na formação do polioliol.^{2,3}

Os produtos obtidos foram analisados por ensaio de estabilidade oxidativa e os resultados estão apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Resultados do ensaio de estabilidade oxidativa.

Material	Estabilidade oxidativa (min)
OAM	31,51
Epóxido	72,00
Polioliol	64,00

O aumento da estabilidade oxidativa do epóxido e do polioliol é significativo, em relação ao OAM, demonstrando a eficácia do método utilizado. Além disso, a reação do polioliol ainda pode ser aprimorada para obter melhores resultados.

Foram realizadas análises por espectroscopias no infravermelho com transformada de Fourier (FT-IR) e ressonância magnética nuclear (RMN) de ¹H, que confirmaram a ocorrência das reações.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao IQ-UnB, CNPq e CAPES pelo suporte financeiro.

Referências

1. Matos, P.R.R. Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 2018, 132, 293.
2. Breves, R.A. Modificação Química dos Óleos da Amêndoa e da Polpa da Macaúba (*Acrocomia aculeata* (Jacq.) Lood. ex Mart) para a obtenção de Epóxidos. Dissertação de Mestrado, Universidade de Brasília, 2018.
3. McMurry, J. Química orgânica, Vol. 2, 7ª ed. Editora Cengage Learning. São Paulo, 2011.

Estudo das propriedades físico química e biológicas de blendas de poli(3hexiltiofeno)/poli(*N*-vinilcaprolactama-*co*-acrilato de *n*-butila)

Sara R. Nahra¹ (PG), Lara Nahra¹ (PG) Mauricio P. Oliveira¹ (PQ), Lilia M. Guerrini¹ (PQ) Fernando H. Cristovan² (PQ),
fhcristovan@gmail.com.

¹ Instituto de Ciência e Tecnologia, Universidade Federal de São Paulo;

² Unidade de Ciências Exatas e Tecnologia, Universidade Federal de Jataí.

Palavras-chave: propriedades térmicas e elétricas, poli(*N*-vinilcaprolactama), poli(3-hexiltiofeno).

Os polímeros condutores podem estimular a adesão e proliferação de diversos tipos de células, estes materiais podem ser utilizados na construção de *scaffolds* para engenharia tecidual. Entretanto, ainda são pouco estudados para esta aplicação. Um bom candidato para ser usado como biomaterial são as blendas de poli(*N*-vinilcaprolactama) (PNVCL), que é biocompatível, sensível à temperatura e possui boa resistência mecânica com poli(3-hexiltiofeno), P3HT, que proporciona propriedades condutoras ao material [1]. Desta forma, neste trabalho foram realizadas as sínteses da poli(*N*-vinilcaprolactama-*co*-acrilato de *n*-butila) [P(NVCL-*co*-ABu)] e do poli(3-hexiltiofeno) (P3HT). Em seguida, foram preparadas blendas do P3HT com a P(NVCL-*co*-ABu) por solução e processados por *casting* e eletrofiação. A partir de análises de infravermelho por transformada de Fourier (FT-IR) foi comprovada a formação dos polímeros. Pela análise de DTG verificou-se que a presença de P3HT na matriz polimérica não afetou significativamente a degradação do material. Já as análise de DSC mostram que a inserção de P3HT na matriz polimérica diminuiu significativamente do material de Tg (de 120°C para 80°C). Os testes de citotoxicidade mostraram que o polímero condutor aumentou a viabilidade celular do material, mesmo as blendas apresentando caráter resistivo. Desta forma, as blendas processadas na forma de mantas de P3HT-*co*-ABU/P3HT apresentam características apropriadas para serem utilizadas como suportes para engenharia tecidual.

Agradecimentos

FAPESP, CAPES e CNPq

Referências

1. Hakim, M., Verhoeven, V., Mcmanus, N. T., Dubé, M. A., Penlidis, A. *App. Polym.*, 2000, 77, 602.

Estudo de Estrutura Eletrônica de Inibidores da Tirosina Quinase (BCR-ABL T315I)

Letícia A. Nascimento¹ (IC), João E. Saraiva¹ (IC), José L. L. Alcantara¹ (IC), Luiz F. Moennich¹ (IC), Érica C. M. Nascimento¹ (PQ), João B. L. Martins¹ (PQ)*

¹Universidade de Brasília, Laboratório de Química Computacional, IQD, CP 4478, Brasília-DF, Brasil.

lopes@unb.br

As proteínas tirosinas quinases são enzimas responsáveis pela catálise e transferência do grupo fosfato, presente na adenosina trifosfato (ATP), para resíduos de tirosina dos substratos proteicos¹. Entretanto, algumas delas apresentam um gene oncológico, ou seja uma mutação, que proporciona um comportamento análogo² ao de uma proteína saudável. Por esse motivo, selecionamos a BCR-ABL T315I e os inibidores específicos a ela.

Neste trabalho foi feito o estudo de estrutura eletrônica de TKIs (*tyrosine kinase inhibitors*) utilizando os métodos semiempíricos AM1, PM3 e PM6 por meio do pacote computacional Gaussian09. Como mostrado na Figura 1 foram estudados os orbitais de fronteira, bem como cargas dos heteroátomos, dipolo, GAP, tamanho respectivo da molécula, distância entre hidrogênios mais ácidos dos seguintes inibidores: Afatinibe, Axitinibe, Dasatinibe, Erlotinibe, Gefitinibe, Imatinibe, Lapatinibe, Nilotinibe, Pazopanibe, Ponatinibe, Sorafenibe e Tozasertibe.

A maior parte dos inibidores estudados possuem o mesmo mecanismo de ação por meio de uma interação no sítio de ligação do receptor de ATP¹, pois assim inibem a autofosforilação de tirosinas mutadas. Pode-se observar que, a maioria dos inibidores apresenta como heteroátomo mais negativo um átomo de oxigênio ou nitrogênio, como também possuem o tamanho de suas moléculas na faixa dos 11,27 a 23,70 Å. Entretanto, quando comparados entre si, exibem uma diferente disposição de seus orbitais (Figura 2), mostrando-nos um indicador da interação desses inibidores com a proteína BCR-ABL T315I.

Palavras-chave: *Inibidores*, tirosina quinase, BCR-ABL T315I, estrutura eletrônica.

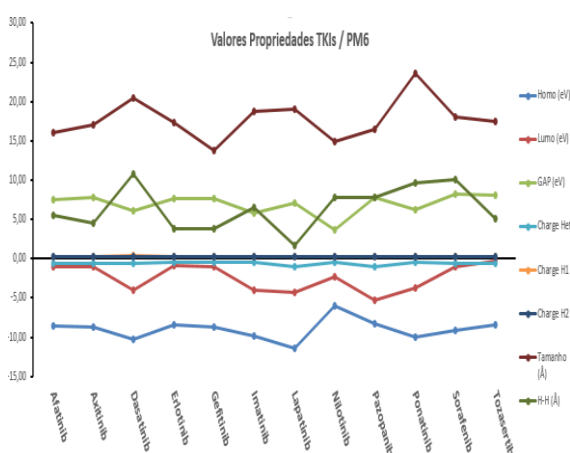


Figura 1. Propriedades Eletrônicas dos TKIs, calculadas pelo método semiempírico PM6.

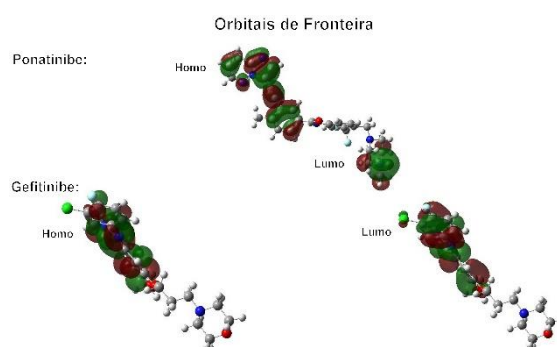


Figura 2. Orbitais de fronteira dos inibidores Gefitinibe e Ponatinibe, calculados pelo método semiempírico PM6.

Agradecimentos: CNPq, UnB, PROIC-UnB, LQC.

Referências

1. **Silvia**, Bárbara V., et al. *Quim. Nova*, 32 (2009) 453-462 e Doublet, P., Vincent, C., Grangeasse, C., Cozzone, A.J., Duclos, D. *FEBS.*, 445 (1999) 137-143.
2. MOC Brasil.

Estudo DFT de interações de complexos envolvendo H₂S

João B. L. Martins (PQ)¹, Elfi Kraka (PQ)², Elton A. S. de Castro³

¹Instituto de Química, Laboratório de Química Computacional, Universidade de Brasília, CP 4478, Brasília, DF

²CATCO, Department of Chemistry, Southern Methodist University, 3215 Daniel Avenue, Dallas, Texas 75275-0314, EUA

³Universidade Estadual de Goiás (UEG), Campus Formosa, GO, Brazil

Palavras-chave: H₂S, ab initio, dímeros.

O gás Sulfeto de hidrogênio apresenta intensa relação com química ambiental. A alteração da composição da atmosfera terrestre tem como principal fator as atividades humanas, tanto pelo aumento da concentração de alguns dos seus componentes quanto pela inclusão de outras espécies químicas [1]. Os diversos aspectos que envolvem essa questão fazem com que este gás seja de interesse para várias áreas da ciência como a Física, a Química, e a Medicina entre outras. Ocorrências de H₂S podem ser encontradas nas jazidas de petróleo e gás natural, na extração de sal (cloreto de sódio), nas águas subterrâneas, em esgotos sanitários e entre outros. Nos segmentos industriais o H₂S é oriundo de processos de remoção de gases ácidos, de tratamento de efluentes, de fermentações entre outros. Os efeitos nocivos dessa poluição atmosférica no meio ambiente já são observados em diversas regiões da Terra e, portanto, um tema de relevância global [2]. Nesse contexto, passa a ser de extrema importância a realização de estudos de processos de interação entre as espécies químicas que podem ser encontradas na atmosfera.

O objetivo principal desse projeto é a determinação, por parâmetros de estrutura eletrônica, das interações intermoleculares entre dímeros e complexos contendo a estrutura H-S...X. Mais especificamente, serão estudadas as interações do tipo H-S...π, e H-S...X, dentre as quais, H₂S ... H₂S, H₂S ... NO, H₂S ... CO, H₂S ... CO₂, H₂S ... Benzeno, H₂S ... Fenol, H₂S ... Clorobenzeno, H₂S ... Nitrobenzeno, H₂S ... C₂H₂ e H₂S ... C₂H₄. Para tanto, foi utilizado o programa de estrutura eletrônica GAUSSIAN09. Os cálculos de otimização foram realizados empregando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) com os funcionais B3PW91 e ωB97X-D e o conjunto de base aug-cc-pVTZ. Foram utilizadas diferentes análises para a energia de interação, incluindo o erro de superposição de função de base (BSSE) e a energia do ponto zero (ZPE). A maior energia de interação foi encontrada para o dímero H₂S-H₂S, com ambos os métodos.

A análise de energia de interação de diferentes complexos envolvendo o H₂S mostra que o mais estável é o dímero H₂S-H₂S. O DFT apresentou uma boa correlação com a literatura.

Agradecimentos: CNPq, CAPES, FAPDF.

Referências

[1] L. Remuzgo, G. Truelba, J. M. Sarabia, *Physica A*, 2016, 444, 146-157.

[2] F. D. Meylan, V. Moreau, S. Erkman, *J. CO₂ Utilization*, 2015, 12, 101-108

ESTUDO TEÓRICO DA REAÇÃO ENTRE ÓXIDO DE FORMALDEIDO E MONÓXIDO DE CARBONO SOB EFEITO DA TEMPERATURA UTILIZANDO A DINÂMICA MOLECULAR DE CAR-PARRINELLO

Mikaele L. S. Santos¹ (IC)* *mickaellakatrina@gmail.com*, **Solemar S. Oliveira²** (PQ).

¹ Curso de Química Industrial, BIC/UEG, Universidade Estadual de Goiás, Campus de Ciências Exatas e Tecnológicas-Henrique Santillo (CCET), Br 153, n. 3105, Fazenda Barreiro do Meio.

² Físico de semicondutores, Prof. Doutor, Universidade Estadual de Goiás, Campus de Ciências Exatas e Tecnológicas-Henrique Santillo (CCET), Br 153, n. 3105, Fazenda Barreiro do Meio, Anápolis-GO.

Palavras-chave: Propriedades geométricas, Temperatura, Eletrônica.

O interesse fundamental da pesquisa relacionada ao CH_2OO está focado num claro entendimento da química atmosférica, que permitira uma maior compreensão da capacidade oxidante da atmosfera está relacionada ao efeito estufa e também à formação de poluentes e aerossóis. Em estudos de dinâmica podemos verificar a difusão da molécula no meio aquoso e interagindo com CO fornecendo informações relevantes para o estado da sua absorção no organismo. A relevância deste trabalho está no fato de a modelagem molecular fornecer valores comparativos para a estrutura da molécula obtida, tempo de reação, dentre outros. Este trabalho teve por objetivo principal estudar as propriedades geométricas de óxido de formaldeído como sua interação com o monóxido de carbono utilizando a dinâmica molecular de Car-Parrinello (DMCP). É possível descrever a energia eletrônica separadamente da energia nuclear. Para a realização do DMCP foi empregado o algoritmo Verlet, propõe-se utilizar o tamanho do passo em torno de 36.300 e realizar cálculos para um valor superior a 300.000 passos de simulação, ou para um tempo da ordem de 70 ps. Nas simulações de DMCP concebeu um produto em que deriva do sistema composto por quatro moléculas de CH_2OO no meio de dez moléculas de CO na temperatura de 100, 300, 600, 900K. Mantiveram uma distância praticamente constante e a suas estabilidades se mantem estável o que garante a concepção da ligação. Os resultados obtidos da simulação de Dinâmica Observa-se excelente concordância entre os resultados teóricos da Dinâmica Molecular de Car-Parrinello e os valores obtidos por DFT para comprimentos de ligação e ângulos. É possível notar que a distância entre os átomos no início da simulação de foram diminuindo e após a aproximação eles mantiveram uma distância praticamente constante e permanece estável durante a simulação, que possibilitou a comparação com os comprimentos das ligações teóricas. Houve a estabilidade desse composto, em que foram construídos pelo monitoramento das distâncias de ligações do produto em função do tempo durante a simulação da DMCP no sistema reacional. Através da análise dos resultados obtidos, podemos afirmar que sistema composto por quatro moléculas de CH_2OO no meio de dez moléculas de CO há formação de produtos com correlação á produtos estáveis. O efeito da temperatura está proporcionalmente relacionado à formação dos produtos, em função do tempo de simulações.

Agradecimentos

Ao Programa de Concessão de Bolsa de Incentivo ao Pesquisador da Universidade Estadual de Goiás (BIP), à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Goiás (FAPEG), ao Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica do CNPq (PIBIC).

Referências

- AGUIAR, A. S. N., OLIVEIRA, S. S., CAMARGO, A. J., NAPOLITANO, H. B. Modelagem Molecular: Uma visão detalhada da Dinâmica Molecular de Car-Parrinello. Ciências Moleculares I. Goiânia: Universidade Estadual de Goiás, UEG. p. 42 - 45, 2011.
- BAIERLE, R. J.; ROSSO, E. F. Métodos de cálculo de estrutura eletrônica de materiais nanoestruturados. CIÊNCIA E NATURA - Edição especial III Escola de Inverno de Física, v. 29, n. 2, p. 43-58, 2007.
- BOHM, G. M. Poluição atmosférica: como os principais poluentes provocam doenças. Saúde Total. p. 3-5, 2014.
- BOY, M. Oxidation of SO_2 by stabilized Criegee Intermediate (sCI) radicals as a crucial source for atmospheric sulphuric acid concentrations. Atmos. Chem. Phys. Discuss. 12, 27693-27736, 2012.

Estudo teórico do líquido iônico bmim[PF₆] via dinâmica molecular

Pedro Henrique F. Matias¹ (IC)*, Diullio P. dos Santos (PG)², Ana Gabriela C. Oliveira (PG)¹, Heibbe Cristhian B. de Oliveira¹ (PQ). pedrohmatias@gmail.com

¹Instituto de Química – Universidade Federal de Goiás. ²Instituto de Química – Universidade de Brasília.

Palavras-chave: líquido iônico, dinâmica molecular, GROMACS.

A necessidade de investigar sistemas moleculares em nível microscópico fez os métodos computacionais, dos quânticos aos clássicos, se tornarem ferramentas essenciais. O movimento natural do sistema molecular pode ser simulado por meio de dinâmica molecular (DM), em que os átomos irão se mover e colidir uns com os outros através de uma energia fornecida.^{1,2} Neste trabalho, os sistemas moleculares de interesse serão os líquidos iônicos (LIs), os quais uma variedade extensa de estudos a respeito das interações intermoleculares e ligações de hidrogênio estão sendo realizados por simulações DMs.^{3,4}

Amplamente estudados no âmbito industrial e acadêmico, os LIs são sais orgânicos no estado líquido (ponto de fusão abaixo de 100°C). Estas espécies químicas são conhecidas como solventes verdes e possuem uma complexidade estrutural, apresentando uma série de propriedades características que dependem da natureza dos íons pertencentes ao par iônico.^{3,4}

Deste modo, foi realizada uma simulação no pacote computacional GROMACS (GROningen Machine for Chemical Simulations) versão 2019 beta1 para o LI:1-butil-3-metilimidazólio hexafluorofosfato ([bmim]PF₆). Inicialmente foi feita a minimização da energia do sistema investigado. Após a otimização, a temperatura foi estabilizada em ~300 Kelvin em *ensemble* canônico (NVT) e a pressão em *ensemble* isobárico (NPT). Com a estabilização do sistema pode-se obter a função de distribuição radial (G(r)) e propriedades termodinâmicas, como a densidade com o valor de aproximadamente 1,384 g.cm⁻³, que está próxima ao valor de densidade experimental 1,37 g.cm⁻³.⁵ Portanto, mostrando que a DM apresenta parâmetros e topologia corretos.

Agradecimentos

Instituto de Química (UFG); CAPES; CNPq; Fapeg.

Referências

1. Allen, M. P.; Tildesley, D. J. Computer Simulation of Liquids: Second Edition. *Comput. Simul. Liq. Second Ed.* **2017**, 1–626.
2. Namba, A. M.; Da Silva, V. B.; Da Silva, C. H. T. P. Dinâmica Molecular: Teoria e Aplicações Em Planejamento de Fármacos. *Eclét. Quím.* **2008**, *33* (4), 13–24.
3. Vellis, P. D.; Mikroyannidis, J. A.; Lo, C. N.; Hsu, C. S.; Viciosa, M. T.; Diogo, H. P.; Ramos, J. J. M.; Weingaertner, H.; Weinhold, F.; Worsley, M. A.; et al. Understanding Ionic Liquids at the Molecular Level: Facts, Problems, and Controversies. *Angew. Chemie-International Ed.* **2008**, *47* (4), 654–670.
4. Skarmoutsos, I.; Welton, T.; Hunt, P. A. The Importance of Timescale for Hydrogen Bonding in Imidazolium Chloride Ionic Liquids. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2014**, *16* (8), 3675–3685.
5. Troncoso, J.; Cerdeiriña, C. A.; Sanmamed, Y. A.; Romani, L.; Rebelo, L. P. N. Thermodynamic Properties of Imidazolium-Based Ionic Liquids: Densities, Heat Capacities, and Enthalpies of Fusion of [Bmim][PF₆] and [Bmim][NTf₂]. *J. Chem. Eng. Data* **2006**, *51* (5), 1856–1859.

Inserção e caracterização de ácido fosfotungstico em alumina aplicado à produção de oleato de etila

Mateus F. Paiva^{1*} (PG), Anndréia L. L. Fiusa¹ (IC), José A. Dias¹ (PQ), Sílvia C. L. Dias¹ (PQ). *freitas-paiva@hotmail.com

¹ Universidade de Brasília, Instituto de Química, Laboratório de Catálise, 70904-970, Brasília - DF.

Palavras-chave: Ácido fosfotungstico, Alumina, Impregnação Incipiente, Esterificação, Lixiviação.

A busca por tecnologia competente para suportar uma fase catalítica é de extrema importância para a indústria.¹ Dentro desta perspectiva, tem sido destacado o papel da pesquisa no desenvolvimento de novos materiais heterogêneos que possam atuar em reações tais como a de esterificação, uma vez que, em condições normais de temperatura e pressão certos produtos são formados lentamente.^{2,3} Diante do exposto, este trabalho consiste na preparação, caracterização e aplicação de catalisadores de ácido fosfotungstico (H₃PW) suportado em alumina (Al₂O₃). Para a síntese dos catalisadores foi utilizado o método de inserção incipiente⁴ e suas caracterizações foram feitas por DRX, FT-IR, MAS RMN de ³¹P e ²⁷Al, sendo estes ainda avaliados quanto à acidez relativa e estabilidade do heteropoliácido no suporte. A reação modelo de esterificação foi feita em reatores de 15 mL com 10% (m/m) de catalisador em relação ao ácido oleico, proporção molar 1:3 de ácido oleico/etanol, temperatura de 80°C / 1 hora. Para a identificação e quantificação dos produtos da reação foram feitas análises por RMN de ¹H. Os resultados das diferentes técnicas (figura 1) revelaram a manutenção do perfil da alumina e a integridade da fase ativa (ânion de Keggin do heteropoliácido H₃PW) nos materiais suportados, cuja inserção levou a formação de nanocristais com boa dispersão. Em relação a efetividade da interação entre heteropoliácido e o suporte, não se observou lixiviação nas amostras sintetizadas, indicando boa estabilidade mecânica. Na reação modelo testada para geração do oleato de etila, apenas a amostra contendo 30% H₃PW/Al₂O₃ alcançou uma conversão considerável de 67%, sinalizando a formação de um catalisador ativo e com viabilidade de ser reutilizado em outros ciclos reacionais. De fato, uma análise da acidez relativa neste material assinalou adequada disponibilidade e força de sítios ácidos de Brønsted.

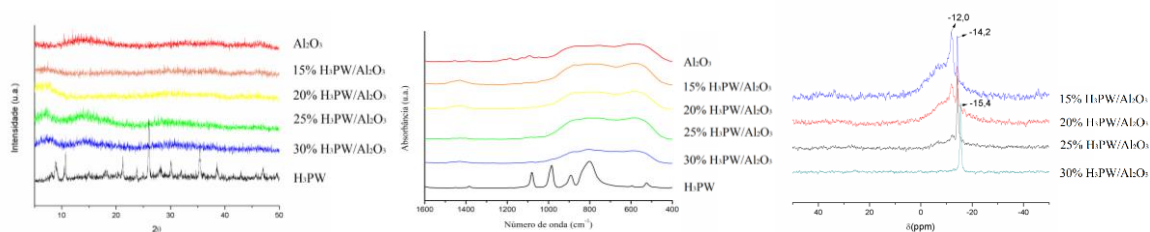


Figura 1. Padrões de DRX, espectros de FT-IR e MAS-RMN ³¹P dos catalisadores sintetizados.

Agradecimentos

DPP/IQ/UnB, CAPES, MCTIC/CNPq, FINATEC, FAP-DF e FINEP.

Referências

1. Misono, M., *Studies in Surface Science and Catalysis*, 2013, 176,10.
2. Kang, T. H. *et al.*, *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*. 2015, 396, 282.
3. Sushkevich, V. L. *et al.*, *Chemistry of Materials*, 2017, 29, 2676.
4. Freitas, E. F., Paiva, M. F., Dias, S. C. L., Dias, J. A., *Catalysis Today*, 2017, 289, 70.

Nanopartículas de $\text{CoFe}_2\text{O}_4@Au$: Propriedades Magneto-Plasmônicas

Thiago Eduardo P. Alves¹ (PQ) e Clemens Burda²
thiago.alves@ifg.edu.br

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás – IFG

²Case Western Reserve University

Palavras-chave: $\text{CoFe}_2\text{O}_4@Au$, Core-Shell, magneto-plásmom.

Nanopartículas magnéticas tem sido estudadas para aplicação em terapia contra o câncer, especificamente em hipertermia magnética, principalmente devido ao fenômeno do superparamagnetismo, que possibilita a transformação do campo magnético alternado em energia térmica. Além disso, a terapia fotodinâmica pode ser eficiente em tratamentos antitumorais, nesse caso a emissão de plásmons pode interferir na química do oxigênio celular desestabilizando a célula enferma, nanopartículas de ouro tem sido apresentadas como candidatas para geração de plásmons [1]. Nesse sentido, apresentamos neste trabalho nanopartículas de ferrita de cobalto recobertas com ouro ($\text{CoFe}_2\text{O}_4@Au$) que pode agregar ambas as propriedades, superparamagnetismo e emissão de plásmons, ou seja uma material magneto-plasmônico [2]. A síntese foi realizada pelo a poliol, e produziu nanopartículas com diâmetro médio de 6 nm, a cobertura de ouro foi realizada utilizando solução de HAuCl_4 em THPC, com posterior redução com auxílio do K_2CO_3 e formaldeído [2,3]. A caracterização foi realizada por difração de raios x (DRX), espectroscopia na região do infravermelho (FTIR), microscopia electronica de transmissão (MET), espectroscopia na região do ultravioleta e visível (UV-VIS) e sistema de medidas de propriedades físicas (PPMS). As propriedades magneto-plasmônicas serão discutidas em termos estruturais, termodinâmicos e de interface entre o núcleo magnético e a casca de ouro para investigar a influência do ouro nas propriedades magnéticas e da ferrite de cobalto em relação às emissões de plásmons.

Agradecimentos:

IFG, Case University, FAPEG, CNPq e CAPES.

Referências:

1. CHAI, Y.; *et al.* Metal Organic Frameworks Combining CoFe_2O_4 Magnetic Nanoparticles as Highly Efficient SERS Sensing Platform for Ultrasensitive Detection of N-Terminal Pro-Brain Natriuretic Peptide. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2016, 8, 7683–7690.
2. LEVIN, C. S.; *et al.* Magneto Plasmonic Core-Shell Nanoparticles. *ACS NANO*, 2009, 3, 1379-1388, 2009.
3. JAGMINAS, A.; *et al.* Gold-Coated Cobalt Ferrite Nanoparticles via Methionine-Induced Reduction. *J. Phys. Chem. C*, 2015, 119, 17398–17407.

Obtenção de mantas eletrofiadas de blendas PNVCL/PVP

Arthur M. Gabriel¹ (IC), Jordanna F. Assis¹ (PG), Emerson R. de Camargo² (PQ), Fernando H. Cristovan² (PQ), Tatiane M. Arantes¹ (PQ)
email: arthurgabriel98@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí

²Universidade Federal de São Carlos

Palavras-chave: eletrofição, polímero bioabsorvível, blenda.

A eletrofição é um processo muito utilizado na preparação de fibras poliméricas¹. Esta técnica envolve o alongamento de uma solução polimérica em um filamento contínuo que é submetido à um forte campo eletrostático. A alta tensão induz uma carga elétrica suficiente para superar a tensão superficial do polímero, resultando em fibras que depositam sobre um coletor, podendo formar mantas². As fibras produzidas por esse processo apresentam uma relação superfície/volume muito alta, e o tamanho do poro pode ser modulado³. Neste trabalho, realizou-se a polimerização da N-vinilcaprolactama por via radicalar, utilizando AIBN como iniciador e buscando obter um polímero em solução com 14% de teor de sólidos. A reação foi feita num reator de reator de polimerização durante 3 horas à 60°C. Após o tempo da reação, removeu-se o solvente da solução por rotaevaporação. Preparou-se a blenda PNVCL/PVP na proporção 70:30. Para eletrofição, utilizou-se uma proporção de 30% da blenda e 70% de solvente (m/m), o solvente utilizado foi o etanol. Essa solução polimérica foi submetida ao processo de eletrofição utilizando uma diferença de potencial de 20 kV e mantendo uma distância de cerca de 10 cm entre a ponta da agulha e o coletor. Foi possível observar a formação de mantas de coloração branca sobre o coletor. Estas foram coletadas para análise por microscopia ótica e por calorimetria diferencial de varredura e espectroscopia de infravermelho. Foram observadas a formação de mantas com alta densidade de fibras uniformes e com pequena quantidade de *beads* ou contas em sua estrutura. Este resultado é muito importante, pois, a PNVCL pura não forma fibras homogêneas e em grandes quantidades. As medidas de DSC mostraram um pico largo em cerca de 90°C no primeiro aquecimento devido à grande quantidade de água que a PNVCL adsorve, e no segundo aquecimento observa-se apenas uma T_g em 149,6 °C, indicando a formação uma blenda miscível entre os dois polímeros. Portanto, pode-se concluir que as blendas de PNVCL/PVP são excelentes candidatos para a produção de mantas eletrofiadas para serem utilizadas como biomateriais.

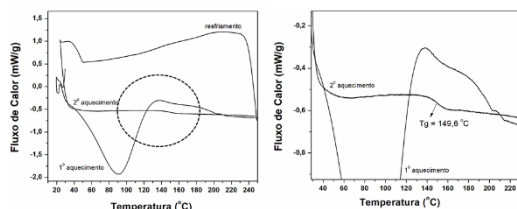


Figura 1. DSC das mantas eletrofiadas

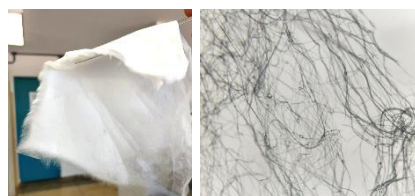


Figura 2. Fotografia da manta eletrofiada e sua imagem de microscopia ótica.

Agradecimentos

Capes, CNPq, LIEC- UFSCar

Referências

1. Xu, F., Gough, I., Dorogin, F., Acta Biomaterialia, 2020
2. Manorama, T., Surekha, P., Pransun, K. R., Material Today Communications, 2020, v.22.
3. Liu, W., Bi, W., Sun, Y., Wang, L., Yu, X., Materials Science & Engineering C, 2020.

ÓXIDO DE TITÂNIO SUPORTADO EM ARGILA PARA DEGRADAÇÃO DE CORANTE ORGÂNICO

Péricles J. H. da C. Lemos*¹(IC), Andressa C. de A. Nascimento¹(IC), Tatiana Batista¹(PQ), Douglas S. Machado¹(PQ)
periclesjk@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí

Palavras-chave: fotodegradação, óxido de titânio, argila, adsorção

Este trabalho teve como objetivo desenvolver um fotocatalisador capaz de degradar moléculas orgânicas a partir da irradiação de luz visível e ultravioleta utilizando um semicondutor suportado em diferentes argilas. O uso da fotodegradação é dada pelos radicais gerados no meio pelo semicondutor, que ao ser irradiado por uma fonte luminosa na frequência correta, excita os elétrons para a banda de condução e gera lacunas na banda de valência. Na presença de água ou peróxido são formados radicais como a OH• com alta poder de degradação e pouca seletividade. O óxido de titânio apresenta baixo *band gap*, por isso possui alta capacidade fotocatalítica, principalmente em sua forma cristalina anatase. Argilas possuem capacidade de adsorver substâncias em suas superfícies, sendo assim utilizada como suporte para o TiO₂, onde as combinações dos dois materiais puderam demonstrar uma melhora na degradação da azul de metileno, corante utilizado no estudo. O TiO₂ foi suportado em diferentes argilas, montimorilonita e laponita rd, nas concentrações de 0,20g em 250ml de suspensão de argila e calcinados por duas horas a 600°C. Os catalisadores obtidos foram testados em soluções de azul de metileno (3,5 x 10⁻⁵ mol.L⁻¹) em alíquotas de 50,0 mL contendo 0,1g de catalisador. Foi avaliado a degradação do azul de metileno, sob irradiação solar e irradiação artificial, acompanhando a capacidade fotocatalítica por UV-Vis. A cinética nos dois catalisadores correspondem a primeira ordem. Observou-se que o catalisador suportado em argila laponita rd, a absorvância caiu 50% no período de 120 minutos e para o catalisador suportado em montimorilonita a queda foi de 80%.

Os materiais se mostraram promissores, podendo atribuir parte da descoloração da solução ao efeito adsorptivo da argila. Entretanto as amostras contendo TiO₂ dopado demonstraram uma maior eficiência quando irradiados por luz natural.

Referências

1. Nogueira. R, F, P; Jardim. W, F;(1998) *Fotocatálise heterogênea e sua aplicação ambiental*. Campinas – SP: Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP. Química Nova, Vol. 21, n° 1 p: 69-72, 1998.
2. Brito. J, M; Rangel. M, C; (2008) *Processos avançados de oxidação de compostos fenólicos em efluentes industriais*. Salvador – BA: Universidade Federal da Bahia, Campus Universitário de Ondina, Salvador – BA. Química Nova, vol. 31 n°01, p: 114-122, 2008.
3. Kunz. A; et. al. (2002) *Novas técnicas no tratamento de efluentes têxteis*. Departamento de Química, Universidade Federal do Paraná, Curitiba – PR. Química Nova, Vol. 25 n° 1 p: 78-82, 2002.
4. Cervantes. T, N, M; Zaia. D, A, M; Santana. H; (2009) *Estudo da fotocatalise heterogênea sobre Ti/TiO₂ na descoloração de corantes sintéticos*. Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, Londrina – PR. Química Nova, vol. 32, n° 09, p: 2423-2428, 2009.
5. Paulino. T, R, S; Araújo. R, dos S; Salgado. B, C, B; (2015) *Estudo de oxidação avançada de corantes básicos via Fenton(Fe²⁺/H₂O₂)*. Engenharia Sanitária e Ambiental vol. 20 n° 3 p:347-352, 2015

Produção de microesferas de quitosana utilizando dois métodos diferentes: coagulação e emulsão

Leidemar F. S. Filho¹ (IC), Maria Helena S. Barroso² (PQ)

leidemar10@hotmail.com.

¹Discente do curso de bacharelado em Química, ²Docente do Curso de Química. ^{1,2} Universidade Federal de Jataí

Palavras-chave: quitosana, microesferas, coacervação e emulsão reticulada

A preparação de microesferas de quitosana é uma estratégia para incrementar a capacidade de adsorção da quitosana, uma vez que as microesferas possuem uma área superficial cerca de 100 vezes maior do que a quitosana em flocos. Portanto, este trabalho consistiu na preparação e caracterização de microesferas de quitosana pelo método da coagulação e emulsão reticulada e a partir disso determinar qual dos dois métodos utilizados será mais viável para a obtenção de microesferas em larga escala para estudos posteriores de cinética de liberação e adsorção de agentes ativos. A quitosana utilizada foi caracterizada pelo grau de desacetilação (GD), determinado por titulação potenciométrica apresentando valor de 80%. O espectro da quitosana na região do infravermelho mostrou bandas características para este tipo de material. As microesferas de quitosana foram obtidas por dois métodos diferentes: **a)** método da coagulação, em que a quitosana solubilizada em uma solução de ácido acético 5%, com o auxílio de uma bomba peristáltica e um compressor foi gotejada em uma solução coagulante de hidróxido de sódio, precipitando assim as microesferas. **b)** método da emulsão reticulada em que a fase dispersa contendo a quitosana em ácido acético 5%, tween foi adicionada em uma fase oleosa contendo parafina, éter de petróleo e Span 80 formando assim uma emulsão de água em óleo (w/o). Em seguida adicionou o agente de reticulação, glutaraldeído (GA) e sucessivas lavagens. As imagens de microscopia eletrônica de varredura (MEV) das microesferas obtidas pelo método da coagulação, mostraram que a quitosana apresentou morfologia de microesferas, com diâmetro que variaram entre 50 a 200µm. As imagens de MEV das microesferas de quitosana obtida pelo método da emulsão reticulada mostraram microesferas de formatos esféricos e ovais, porém mantendo as características de microesferas. Os testes de solubilidade mostraram que microesferas obtidas pelo método da coagulação apresentaram uma boa resistência ao pH ácido e tiveram uma perda de massa de 24,33%. Já as microesferas obtidas pelo método da emulsão reticulada tiveram uma perda de massa de 37,6%. As microesferas obtidas pelo os dois métodos mostraram se semelhantes àquelas encontradas na literatura, porém o método escolhido para estudos futuros foi o método da coagulação, pois o mesmo mostrou-se mais reprodutível, de fácil manuseio, maior rendimento, baixo custo, utilizar menos reagentes tóxicos, além de obter microesferas com uma solubilidade menor.

Agradecimentos

Ao Programa PIVIC/UFG e à Profa. Maria Helena de Sousa Barroso.

Referências

1. LARANJEIRA, M.C.M; FÁVERE, V.T. Quitosana: biopolímero funcional com potencial industrial biomédico. Química Nova. v.32 n. 3. São Paulo, 2009.

Propriedades físico-químicas da goma de tamboril (*Enterolobium contortisilliquum*)

Gislane O. Ribeiro^{1,*} (PG), Olívia R. Teixeira¹ (PG), Maria Luiza Rezende¹ (PG), Kátia F. Fernandes² (PQ), Maria Carolina B. Di Medeiros³ (PQ), Luciano M. Lião⁴ (PQ).
goribeiro.ufba@gmail.com

¹ Escola de Agronomia, Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Alimentos – UFG, CEP 74690-900, Goiânia, GO; ² Instituto de Biologia – UFG, CEP 74690-900, Goiânia, GO; ³Instituto de Química – UFSCar, CEP 13565-905, São Carlos, SP; ⁴Instituto de Química – UFG, CEP 74690-900, Goiânia, GO.

Palavras-chave: exsudado de plantas, polissacarídeos, caracterização centesimal

O Brasil possui grande biodiversidade, sendo que muitas espécies da flora são desconhecidas, considerado como patrimônio químico inexplorado. Das moléculas que podem ser extraídas, os polissacarídeos gomosos são interessantes, em virtude de sua grande aplicabilidade. As gomas provenientes de exsudado vegetal são utilizadas em diversos setores industriais em função de suas propriedades físico-químicas. O Tamboril é uma árvore abundante no território brasileiro, e a goma proveniente do exsudado do tronco destas plantas ainda é pouco explorado, e pode ser usada como substituta de gomas convencionais a depender da aplicação. Assim, o objetivo desse estudo foi investigar as propriedades físico-químicas da goma de tamboril. O polissacarídeo gomoso foi extraído e purificado através de método alcalino. A umidade determinada foi de 12,34%, o que indica boa estabilidade microbiológica e vida útil longa, com potencialidade de uso em produtos alimentícios por encontrar-se dentro dos limites estabelecidos pela legislação (15%). O teor de cinzas foi de 6,24%, indicando ser rico em material inorgânico, podendo ter um perfil mineral interessante. Mostrou baixo teor de lipídios (0,02%) e proteínas (0,44%) demonstrando que o processo de purificação do polissacarídeo foi eficiente. A concentração de carboidratos foi de 93,33%, sendo a maior fração de carboidratos não digeríveis, sendo caracterizado como material de alto valor de fibras por possuir 78,67% de fibra alimentar, mostrando ser possível sua aplicação em produtos prebióticos, com efeito sobre o trato digestivo. O pH encontrou-se próximo a neutralidade (pH = 6,25), tendo potencialidade de ser aplicado como aditivo alimentar sem provocar grandes modificações do pH no produto final, uma vez que o pH possui forte correlação com a solubilidade. A goma de tamboril possui grande potencial para ser utilizada em diversas áreas industriais, sendo necessário maior investigação de suas propriedades físicas, químicas e físico-químicas, a fim de determinar suas possíveis aplicabilidades.

Agradecimentos

UFG, CNPQ, CAPES, FAPEG, FINEP

Referências

1. Bhushette, P. R., Annapure, U. S. Comparative study of Acacia nilotica exudate gum and acacia gum. *International Journal of Biological Macromolecules*, **2017**, 102, 266-271.
2. Edwards, C. A. Gums: Dietary Importance. Reference Module in Food Science, **2016**, 278–282.

Propriedades funcionais de amido extraído de semente de abacate

Gislane O. Ribeiro^{1,*} (PG), Kátia F. Fernandes² (PQ), Maria Carolina B. Di Medeiros³ (PQ), Luciano M. Lião⁴ (PQ). goribeiro.ufba@gmail.com

¹ Escola de Agronomia, Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Alimentos – UFG, CEP 74690-900, Goiânia, GO; ² Instituto de Biologia – UFG, CEP 74690-900, Goiânia, GO; ³ Instituto de Química – UFSCar, CEP 13565-905, São Carlos, SP; ⁴ Instituto de Química – UFG, CEP 74690-900, Goiânia, GO.

Palavras-chave: amido, semente de abacate, teor de amilose, caracterização físico-química.

O abacate (*Persea americana* Miller) é uma fruta tropical utilizada em vários setores industriais como alimentos, cosméticos e farmacêuticos¹. Seu processamento gera grandes quantidades de resíduos, que são descartados e podem gerar problemas ambientais^{1,2}. A semente de abacate possui em sua composição aproximadamente 29% de amido¹, podendo servir como substituto às fontes oficiais de amido para diversas finalidades. Assim, o conhecimento das propriedades físico-químicas dos amidos provenientes de fontes alternativas é importante para determinar sua aplicação. Nesse trabalho foi realizado análises de cor, atividade de água, umidade, cinzas, lipídios, proteínas, teor de amilose, índice de solubilidade e absorção de água para caracterização do amido nativo. O amido apresentou-se como um pó fino de coloração branco, com luminosidade de 95,51, coordenada de cromaticidade *a (1,12) e *b (3,64) refletindo alta pureza do amido. Mostrou baixa atividade de água ($0,49 \pm 0,002$) e umidade ($10,05 \pm 0,1\%$) o que indica boa estabilidade microbiológica e vida útil longa. O teor de cinzas foi de $0,034 \pm 0,007$ g/100g⁻¹, lipídios de $0,43 \pm 0,008$ g.100g⁻¹ e não apresentou teores de proteína, mostrando que o processo de extração e purificação do amido foi eficaz. Os experimentos evidenciaram um amido rico em amilose ($41,0 \pm 0,003\%$), com índice de solubilidade e absorção de água de $0,48 \pm 0,09$ e $1,78 \pm 0,010$ respectivamente, apresentando boas características para ser usado em diferentes segmentos industriais como alimentos (como agente espessante e gelificante), indústria de papel (em adesivos e agentes aglutinantes), materiais de revestimento de produtos farmacêuticos e embalagens com boas propriedades de barreira ao oxigênio.

Agradecimentos

UFG, CAPES, CNPQ, FINEP, FAPEG, Lab de Análise de Alimentos (PPGCTA)

Referências

1. Chel-Guerrero, L., Barbosa-Martin, E., Martinez-Antonio, A.; González-Mondragón, E. & Betancur-Ancona, D. *International Journ. Of Biol. Macromolecules* Some physicochemical and rheological properties os strach isolated from avocado seeds. **2016**, *86*, 302-308.
2. Dávila, J. A.; Rosenberg, M.; Castro, E. & Cardona, C. A. *Bioresource Technology* A model biorefinery for avocado (*Persea americana* mil.). **2017**, *243*, 17-29.
3. Wang, A., Wang, X., Zang, L., Tan, B., Xu, H., “Physicochemical , functional and emulsion properties of edible protein from avocado (*Persea americana* Mill .) oil processing by-products,” vol. 288, no. January, pp. 146–153, 2019.

Reação de desacetilação da quitosana comercial e obtenção de hidrogéis para uso como biomateriais

Raissa F. Araújo¹(IC)*, Maria Helena S. Barroso² (PQ). raah.araujo995@gmail.com

¹Discente do curso de bacharelado em Química,² Docente do Curso de Química. ^{1,2} Universidade Federal de Jataí

Palavras-chave: Quitosana, reação de desacetilação, titulação e hidrogéis

A quitosana é um biopolímero do tipo polissacarídeo, atóxico, biodegradável, biocompatível. É um derivado da quitina e tem sido utilizada por vários pesquisadores em função do seu grande potencial de aplicação, este biopolímero versátil pode ser utilizado em diferentes formas físicas tais como: nanopartículas, pó, microcápsulas, microesferas, fibras, membranas, esponjas e hidrogel. A quitosana é obtida pela N-desacetilação da quitina, que remove o grupo acetil por meio de tratamento com bases fortes, ou por métodos microbiológicos. A principal característica que pode afetar a propriedade da quitosana na maioria das aplicações, como por exemplo, em sistemas de liberação de fármaco, na área de engenharia de tecidos, é o grau de desacetilação, uma vez que controla a fração de grupos amino livres que podem estar disponíveis para interagir com os grupos reativos dos fármacos, células, e outros ativos. A atividade antimicrobiana da quitosana também está relacionada com o aumento do grau de desacetilação, pois terá mais grupos amino protonados que são capazes de ligar aos grupos aniônicos das paredes celulares de micro-organismos, inibindo o crescimento destes. Biomateriais de quitosana, entre eles, filmes, membranas e hidrogéis que vem sendo bastante estudados para as aplicações em dispositivos de liberação controlada de fármacos, na área de engenharia de tecidos, principalmente para cicatrização de feridas, na reconstrução de tecidos moles, entre outras aplicações. De modo particular, hidrogéis de quitosana, destaca-se em virtude de suas propriedades, além da biocompatibilidade, biodegradabilidade, propriedades antibacterianas, osteogênicas, capacidade de reter, liberar e distribuir, agentes terapêuticos (fármaco), no local de aplicação, entre outras. Neste contexto o objetivo desse trabalho foi intensificar as propriedades já existentes da quitosana a partir do aumento do grau de desacetilação, para isso a quitosana foi submetida à reação de desacetilação com hidróxido de sódio para retirar os grupos acetil da estrutura. A partir da quitosana com alto grau de desacetilação produzir hidrogéis para uma possível aplicação futura em engenharia de tecidos. Os GDs obtidos por titulação condutimétrica e potenciométrica antes da reação foram de 72,5 e 76,3 % e após a reação com NaOH foram de 80,5 e 84,3% respectivamente. Apesar das várias tentativas e dos diversos procedimentos metodológicos utilizados, não foi possível sintetizar hidrogéis estáveis, estes se mostraram frágeis e não resistentes dificultando seu manuseio e a realização de testes de caracterizações.

Agradecimentos

Ao Programa PIVIC/UFG e à Profa. Maria Helena de Sousa Barroso.

Referências

1. ANJUM, S.; ARORA, A.; ALAM, M.S.; GUPTA, BHUVANESH. Development of antimicrobial and scar preventive chitosan hydrogel wound dressings. **International Journal of Pharmaceutics**, 2016, v.508, p. 92-101.

Síntese e aplicação de biocoagulante natural funcionalizado com nanopartículas magnéticas para o tratamento de efluente real de indústria de tinta

Jordanna K. R. Aleixo (IT)¹, Mayra S. de Oliveira (PG)¹, Leonardo S. Andrade (PQ)¹
jordannaaleixo2@gmail.com

¹ Universidade Federal de Catalão, Unidade Acadêmica Especial de Química, Catalão, GO, Brasil.

Palavras-chave: Coagulação, Moringa Oleífera, nanopartículas.

Nos últimos anos, os recursos hídricos têm se tornado um dos motivos de preocupação mundial, visto que o crescimento populacional e o excessivo uso de águas nas atividades industriais têm afetado a sua disponibilidade e a qualidade no planeta. Nesta perspectiva, é indispensável a implementação de tratamentos de efluentes que possibilitam o descarte e/ou reuso^{1,2}. Sabendo-se que as indústrias de tinta são umas das maiores consumidoras de águas e os efluentes gerados apresentam características críticas, tais como elevada coloração e turbidez, forte odor e altas concentrações de substâncias químicas e tóxicas¹, o presente trabalho mostra resultados da investigação do método de coagulação química utilizando um coagulante natural, (Moringa Oleífera-MO) associado com sais de Ca²⁺, funcionalizado com nanopartículas magnéticas de óxido de ferro sintetizadas, no intuito de reduzir os parâmetros iniciais e o tempo da sedimentação no processo de coagulação por meio do emprego de ímãs ao final do processo de coagulação.

Inicialmente, realizou-se a síntese das nanopartículas magnéticas de óxido de ferro pelo método de coprecipitação³. Após a síntese, prosseguiu-se com os ensaios de coagulação, onde realizou-se o estudo para verificar a melhor concentração de nanopartículas presente no extrato de MO fortificado, partindo de uma condição já otimizada em trabalho anterior do grupo de pesquisa². Assim, foi possível concluir que a melhor condição encontrada para o processo de coagulação foi utilizando um extrato de MO contendo 50 mg/L de óxido de ferro, o qual apresentou redução de sólidos em suspensão de até 99,7% e sem cor aparente.

Apesar de obter bons resultados em termos de remoção turbidez e cor, ao reproduzir o ensaio para averiguar tanto a dosagem quanto o efeito das nanopartículas magnéticas de óxido de ferro, oscilações nos resultados ainda puderam ser observadas. Portanto, estudos adicionais se fazem necessários para uma avaliação mais criteriosa quanto à influência das nanopartículas magnéticas no tempo de sedimentação dos flocos. Além disso, pretende-se ampliar o estudo sobre a concentração das nanopartículas de óxido de ferro presente no extrato de MO fortificado para concentrações ≤ 50 mg/L, levando-se também em consideração o tempo de sedimentação.

Agradecimentos

UFCAT

Referências

1. L. F. da Silva; A. D. Barbosa; H. M. Paula; L.L. Romualdo; L. S. Andrade, *Water Res.*, 2016, 101: 467-475.
2. A.D. Barbosa; L. F. da Silva; H. M. Paula; L.L. Romualdo; G. Sadoyama; L. S. Andrade, *Water Research* 145 (2018) 153-161.
3. L. C. M. Scapim; S. B. Borges; J. N. de Paula; L. P. Ferreira; P. R. de AlmeidaIII, *The Journal of Engineering and Exact Sciences*, Vol 03 N.08 (2017) 1182-1191.

Síntese e caracterização de catalisadores magnéticos a base de ferro

Gabriel A. A. Diab^{1*} (IC), Sílvia C. L. Dias¹ (PQ), José A. Dias¹ (PQ).
 *gabrieldiab2000@gmail.com

¹Laboratório de Catálise, Instituto de Química, Universidade de Brasília, Campus Darcy Ribeiro, Asa Norte, Brasília-DF, 70910-900.

Palavras-chave: nanopartículas magnéticas, magnetita, sílica, core-shell, ácido fosfotúngstico.

As nanopartículas magnéticas (NPM) têm recebido maior notoriedade na área da catálise devido à utilização do magnetismo como facilitador no processo de separação dos produtos. No entanto, em condições de alta temperatura e baixo pH, pode ocorrer a perda de seu magnetismo. Para contornar tal problema, uma estratégia é revestir a NPM com materiais como sílica ou alumina. Nesta pesquisa, foi utilizada a magnetita (Fe_3O_4) a qual possui a propriedade de superparamagnetismo, revestida com SiO_2 (NPM@SiO_2) como suporte. Ao suporte, foi impregnado o ácido fosfotúngstico ($\text{H}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$, HPW) em diferentes proporções. Os materiais foram então caracterizados através de difração de raios X (DRX) e espectroscopia no infravermelho (FT-IR). A NPM foi preparada utilizando a metodologia de coprecipitação do Fe^{2+} e Fe^{3+} . Portanto, 1,251 g de $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ e 2,433 g de $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ foram dissolvidos em 30 mL de água deionizada e 6 mL de solução aquosa de amônia. A solução foi mantida em um sistema de refluxo sob agitação a 90 °C por 6 h. O precipitado produzido foi lavado e seco a 40 °C. Em seguida, o revestimento com SiO_2 foi feito através do método sol-gel gerando um sistema do tipo core-shell¹. Dado isso, a NPM foi dispersa em uma solução de etanol e H_2O deionizada na proporção 4:1 seguida de adição de 1,9 mL de NH_4OH e 375 μL de tetraetilortosilicato. A mistura foi mantida sob agitação mecânica a temperatura ambiente por 6 h. O precipitado foi lavado, seco a 60 °C e calcinado a 200 °C por 2 h. Por fim, a fase ativa foi inserida por impregnação incipiente². Os difratogramas (Figura 1) apresentam picos referentes a uma estrutura do tipo espinélio, característica da fase magnetita e maghemita que também possui propriedades magnéticas. Os espectros de FT-IR (Figura 2) apresenta estiramentos da ligação Fe-O na faixa de 640 e 570 cm^{-1} , ligações Fe-O-Si em 472 cm^{-1} inferindo interação do núcleo (NPM) com a camada (shell) de sílica e vibrações características da estrutura de Keggin. Os dados texturais indicam uma redução progressiva na área específica da NPM pura, o que sugere que pode ter havido uma agregação das NPM e bloqueio dos poros pelo revestimento da sílica e da fase ativa de Keggin na superfície da NPM.

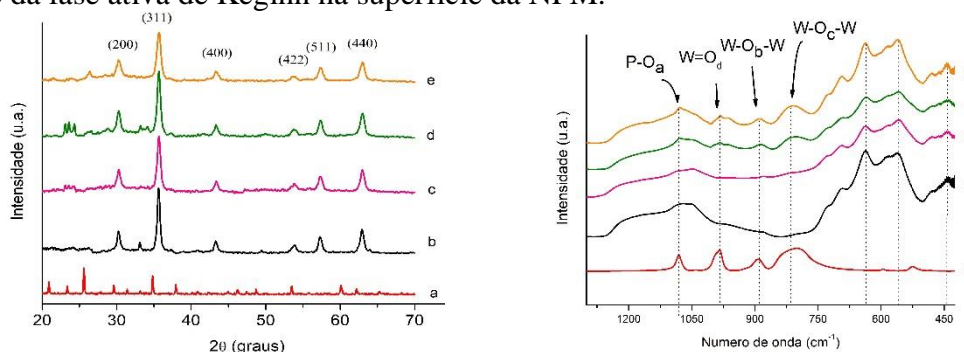


Figura 1 e 2: DRX e espectros de FT-IR de: a) HPW b) NPM@SiO_2 c) 10% HPW/ NPM@SiO_2 d) 20% HPW/ NPM@SiO_2 e) 30% HPW/ NPM@SiO_2 .

Referências

1. Mendonça E.S.D.T., et al., Dias J.A. Surfaces and Interfaces. 2019, 14, 34.
2. Ertl G.G., Weitkamp, J. J., Handbook of Heterogeneous Catalysis, (Eds.), Weinheim, 2008.

Síntese e Caracterização de Poli(L-Ácido Lático-co-Ácido Glicólico) por Policondensação Direta Utilizando Catálise Heterogênea.

Naylon B Gomes¹ (PG), Andréa R Chaves¹ (PQ), Denilson Rabelo¹ (PQ).
naylon.quim@gmail.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás.

Palavras-chave: PLGA, policondensação direta e catálise heterogênea.

O Poli(ácido L-lático-co-ácido glicólico) PLGA é de grande interesse tecnológico devido às suas características de biodegradabilidade e biocompatibilidade.^{1,2} Um polímero biodegradável bastante utilizado em aplicações biomédicas como carreadores de fármacos de forma controlada, confecção de próteses ortopédicas, matrizes para regeneração de tecidos, suturas e entre outros.^{2,3} Em geral o PLGA é sintetizado por polimerização por abertura de anel, porém esta metodologia possui como desvantagem os altos custos dos dímeros que exigem uma purificação eficiente e o uso de catalisadores homogêneos que contaminam o produto final.⁴ Uma rota sintética alternativa é a policondensação direta dos monômeros, que consiste em uma polimerização por etapas, tendo como principal vantagem ser uma síntese de baixo custo que utilizam monômeros mais baratos e menos sensíveis a reações de hidrólise, também por ser uma produção mais limpa podendo utilizar catalisadores heterogêneos para reduzir a contaminação do produto.⁵ Neste contexto, foi sintetizado PLGA's através da policondensação direta do ácido lático com o ácido glicólico, catalisada em meio heterogêneo pelo composto copolímero estireno-divinilbenzeno/Polianilina (Sty-DVB/Pani). Os PLGA's foram analisados por espectroscopia na região do infravermelho (IV), difração de raios X (DRX), ressonância magnética nuclear (RMN H¹) e espectrometria de emissão atômica por plasma acoplado (ICP-OES). Otimizou-se o processo avaliando parâmetros importantes que influenciam na massa molecular dos PLGA's, como temperatura, tempo e quantidade de catalisador. A partir das técnicas empregadas pode-se avaliar a estrutura e composição química, razão monomérica e o grau de contaminação dos PLGA's. Para determinação da massa molar foi analisado a viscosidade inerente, na qual apresentou resultados satisfatórios com valores de 0,11 a 0,18 dL.g⁻¹. A contaminação por estanho oriundo do catalisador heterogêneo, apresentou valores em ppm muito abaixo do especificado pela ANVISA.

Agradecimentos

REDE-CO-NANO, FAPEG, IQ-UFG.

Referências

1. Rydz, J, et al; Polyester-Based (Bio)degradable Polymers as Environmentally Friendly Materials for Sustainable Development. *Int.J.Mol.Sci*, 16, 564-596, 2015.
2. Tian, H.; Tang, Z.; Biodegradable synthetic polymers: Preparation, funcionalization and biomedical application. *Progress in Polymer Science*; 37, 237-280, 2012.
3. AZIMI, B., et al.; Poly (lactide -co- glycolide) Fiber: An Overview. *Journal of Engineered Fibers and Fabrics*, 9, 47-66, 2014.
4. YUNZI, H., et al.; Newly Developed Techniques on Polycondensation, Ring-Opening Polymerization and Polymer Modification: Focus on Poly(Lactic Acid). *Materials*, 9, 2016.
5. WANG, Z., et al.; Synthesis of Poly(lactic acid-co-glycolic acid) Serial Biodegradable Polymer Materials via Direct Melt Polycondensation and Their Characterization. *Journal of Applied Polymer Science*, 99, 244-252, 2005.

Síntese, caracterização e avaliação das propriedades dielétricas do material cerâmico $Zn_{1-x}Ga_xO_\delta$

Gabriela G. Miranda¹ (PG), Adolfo F. Júnior²
bigomesmiranda@gmail.com

¹ Universidade Federal de Goiás – Instituto de Química, ²Universidade Federal de Goiás – Instituto de Física

Palavras-chave: materiais cerâmicos, dopagem, ZnO, propriedades dielétricas.

Com o rápido avanço tecnológico tem-se aumentado intensamente a necessidade do desenvolvimento de dispositivos eletrônicos que sejam cada vez menores, com maior capacidade de armazenamento e funções ampliadas. Neste contexto, é de extrema importância o desenvolvimento de semicondutores que apresentem baixo custo, baixa toxicidade e boa estabilidade química [1]. Recentemente materiais baseados no semicondutor óxido de zinco (ZnO) tem atraído uma grande atenção devido às propriedades aplicáveis em dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos, tendo sido um dos primeiros sistemas cerâmicos policristalinos dopados com óxidos de metais de transição, desenvolvido para aplicação em sistemas de proteção de alta e baixa voltagem. O Ga^{3+} tem se mostrado como uma alternativa promissora para dopagem do ZnO. Os materiais cerâmicos baseados no óxido de zinco dopadas com gálio ($Zn_{1-x}Ga_xO_\delta$) apresentaram propriedades elétricas que fazem do seu uso promissor para aplicações em dispositivos eletrônicos. Por meio das medidas de DRX foi possível observar a solubilidade máxima do gálio na matriz do óxido de zinco e a formação de uma segunda fase de $ZnGa_2O_4$ quando foi utilizado maiores concentrações do dopante. [2]. Os materiais obtidos com alta densidade beneficiaram a eficiente difusão dos íons entre as partículas, de forma que o processo de crescimentos dos grãos e a dopagem influenciaram a criação de defeitos estruturais como as vacâncias de oxigênio na matriz do ZnO, o que modifica suas propriedades eletrônicas, diminuindo a energia de band-gap e aumentando a constante dielétrica para $\sim 10^5$. O Ga^{3+} é um dopante do tipo-n que ao ser introduzido nos sítios do zinco pode causar a migração de íons Zn^{2+} para espaços intersticiais, contribuindo para as vacâncias de oxigênio e aumentando a densidade de elétrons livres [3]. Acreditamos por meio dos dados obtidos até o momento que a dopagem com gálio intensifica as características de condutor do tipo-n do ZnO, permitindo a fabricação de cerâmicas com propriedades funcionais para o desenvolvimento de supercapacitores de próxima geração.

Agradecimentos

Capes

Referências

1. Kumar, David D. Science, Technology, and Society. s.l., Springer Netherlands, 2000. ISBN: 0306461730.
2. Yoon, M. H., et al., Springer Nature, Journal of Materials Science Letters, 2002 Vol. 21, pp. 1703-1704.
3. Paul, G. K. and Sen, S. K. Materials Letters, Elsevier BV, 2002, Vol. 57, pp. 742-746.

Análise de marcadores de consumo de álcool por espectrometria de massas ambiente.

Camilla A. Moraes¹ (IC), Carla S. Freitas¹ (PG), Boniek G. Vaz¹ (PQ).
camsalves18@gmail.com

¹Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Lacem. Camsalves18@gmail.com

Palavras-chave: álcool, biomarcadores, SPE, espectrometria,

A Organização Mundial da saúde relata que o consumo abusivo de álcool no Brasil tem aumentado de forma acelerada nas duas últimas décadas. O álcool é uma substância psicoativa que pode gerar dependência. Além disso, beber para se embriagar é um problema cada vez mais recorrente entre a população. O consumo de álcool de maneira nociva pode desencadear diversas consequências negativas para a sociedade como homicídios e mortes por acidentes de trânsito.

Para o monitoramento de motoristas, análises de teor alcoólico podem ser feita principalmente através do bafômetro, bem como análises de sangue e urina. Um problema visto nessas análises é que o indivíduo deve estar sob efeito de álcool ou ter consumido há pouco tempo. Desta forma, não é possível verificar se houve o consumo ou definir a quantidade ingerida após cerca de 12h. Estes exames ainda possuem interferentes, como fatores de alimentação, quantidade de consumo e organismo do indivíduo. Após o consumo de diversas substâncias o organismo deixa traços do seu processamento, os chamados “biomarcadores”. Para o consumo de álcool, os mais comuns são o etil sulfato (EtS) e o etil glucoronideo (EtG). Traços desses biomarcadores são encontrados na urina por cerca de 48h após o consumo.

A técnica mais utilizada para análise de tais substâncias é cromatografia líquida, a qual demanda um preparo da amostra laboroso e muitas vezes inviável. Como alternativa, temos a detecção por espectrometria de massas (MS) por meio de fontes de ionização ambiente. Estas fontes necessitam de mínimo de preparo de amostra para análises de matrizes biológicas e complexas como urina. Devido ao exposto esse estudo visa desenvolvimento de análise de biomarcadores de álcool via espectrometria de massas ambiente. Amostras de urina artificial foram dopadas com padrões certificados, submetidas extração em fase sólida (SPE) e em seguida à análises de MS ambiente. Espera-se que os resultados demonstrem linearidade e alta precisão para curva de calibração com níveis de detecção à concentração em partes por bilhão (ppb). Este estudo demonstra ser uma promissora alternativa para controles de abuso no consumo de álcool de indivíduos os quais a análise necessita ser feita após o desaparecimento de traços de embriaguez.

Agradecimentos

CNPQ, CAPES, UFG.

Referências

1. Gómez-Ríos, G. A.; Reyes-Garcés, N.; Bojko, B.; Pawliszyn, J. Anal. Chem. 2016, 88, 1259-1265.
2. Janda, I. Alt, A. Journal of Chromatography B. 758 (2001) 229–234
3. Zhang, C.; Manicke, N. E. Anal. Chem. 2015, 87, 6212–6219; b) Lafrenière, N. M.; Mudrik, J. M.; Ng, A. H. C.; Seale, B.; Spooner, N.; Wheeler, A. R. Anal. Chem. 2015, 87,3902–3910; c) Gómez-Ríos, G. A.; Reyes-Garcés, N.; Bojko, B.; Pawliszyn, J. Anal. Chem.2016, 88, 1259-1265.

Aplicação de filmes biodegradáveis como sensor colorimétrico para amônia em alimentos estragados

Pedro V. V. Romanholo¹ (PG), Maurício V. Cruz^{2,3} (PQ), Kátia F. Fernandes² (PQ), Livia F. Sgobbi¹ (PQ).

romanholo.pedro@gmail.com

¹Instituto de Química – Universidade Federal de Goiás, 74690-900, Goiânia, Brasil; ²Instituto de Ciências Biológicas – Universidade Federal de Goiás, 74690-900, Goiânia, Brasil; ³Instituto Federal de Goiás, 76400-000, Uruaçu, Brasil

Palavras-chave: Sensor colorimétrico, amônia, filmes biodegradáveis.

Em um contexto onde estima-se que 1/3 dos alimentos produzidos são desperdiçados [1], diversas estratégias têm sido propostas objetivando, principalmente, a otimização das condições de armazenamento de alimentos [2]. Nesse sentido, sensores químicos, em especial sensores ópticos, têm sido aplicados na detecção de compostos orgânicos voláteis (COV), comumente liberados durante o apodrecimento de alimentos [3]. Dentre os principais COVs, a amônia é comumente utilizada para estimar o grau de frescor de carnes e peixes [4]. Neste trabalho, é proposta a construção de um sensor colorimétrico para a detecção de amônia proveniente de peixes e carnes em processo de deterioração. Para a obtenção do sensor, foram preparados filmes baseados em polissacarídeos extraídos da goma de cajueiro e álcool polivinílico (PVA). A seleção do filme utilizado no sensor foi conduzida por meio da otimização da concentração do polissacarídeo, do PVA e do agente oxidante empregado (NaIO_4). O filme resultante foi, então, caracterizado por microscopia eletrônica de varredura, ensaios mecânicos e índice de intumescimento. Para a obtenção do sensor, o filme foi tratado por 4 horas com uma solução aquosa 0,1% (m/v) do corante verde de bromocresol, resultando em um tingimento avermelhado (na presença de amônia, a coloração vermelha se altera para um azul intenso). Como teste da capacidade de sensoriamento, o sensor obtido foi utilizado para a quantificação de amônia em soluções aquosas de diversas concentrações. Como instrumento de leitura, foi utilizado um *smartphone* munido de um *software* de calibração de cores. A otimização de parâmetros, bem como a configuração final do sensor ainda estão em andamento. Como aplicação-alvo, o sensor será empregado na análise de amostras reais de carnes e peixes.

Agradecimentos: Capes.

Referências:

- [1] FAO, The State of Food and Agriculture 2019. Moving forward on food loss and waste reduction, Roma2019.
- [2] S. Chaillou, A. Chaulot-Talmon, H. Caekebeke, M. Cardinal, S. Christieans, C. Denis, et al., Origin and ecological selection of core and food-specific bacterial communities associated with meat and seafood spoilage, ISME J, 9 (2015) 1105-1118.
- [3] L.H. Nguyen, S. Naficy, R. McConchie, F. Dehghani, R. Chandrawati, Polydiacetylene-based sensors to detect food spoilage at low temperatures, Journal of Materials Chemistry C, 7 (2019) 1919-1926.
- [4] A. Maity, B. Ghosh, Fast response paper based visual color change gas sensor for efficient ammonia detection at room temperature, Sci Rep, 8 (2018) 16851.

Avaliação de método espectrofotométrico para determinação de triclosan em sabonete líquido

Layla H. G. de Oliveira¹ (IC), Silvia K. de B. Alcanfor¹ (PQ).
layla.hellen@hotmail.com

¹Universidade Católica de Brasília, Campus I, QS 07 Lote 1 EPCT, Brasília, DF CEP 71966-700

Palavras-chave: Triclosan, CLS, Espectrofotometria Derivativa.

Introdução: O triclosan, bactericida e conservante, é um micropoluente (ERICKSON, 2002) com possibilidade de dano à saúde humana (WEATHERLY, 2018). CG é indicado para seu doseamento (USP 42, 2019). O objetivo deste estudo é propor um método alternativo para doseamento de triclosan em sabonete líquido formulado pela Fábrica Escola de Farmácia e Química da Universidade Católica de Brasília (FEFQ-UCB).

Metodologia: O pH, a viscosidade e a densidade do sabonete foram medidos. Todos os componentes da formulação foram investigados quanto às suas características espectrais na região do UV. Após otimização da linha base, avaliou-se as soluções de triclosan e o nipagin em solução solvente quanto à linearidade nos intervalos de concentração de 17,5 a 37,5 µg/mL e 1,8 a 3,8 µg/mL respectivamente. Posteriormente a absorvância de 5 soluções com todos os demais componentes do sabonete (solução solvente) contendo triclosan e nipagin em concentrações variadas e conhecidas foram medidas. Os espectros das misturas foram tratados por CLS para estimar os espectros puros dos dois componentes. Cinco misturas binárias de concentrações conhecidas e diferentes das já utilizadas, foram medidas no teste de retorno. As mesmas misturas foram investigadas por espectrofotometria derivada (ED), utilizando a técnica do ponto de anulação.

Resultados e Discussão: Os valores de pH, densidade e viscosidade do sabonete líquido, mostraram-se de acordo com as normas de qualidade (FERREIRA, 2010). Dentre todos os componentes avaliados individualmente na região do UV apenas o nipagin interfere significativamente na determinação do triclosan. Soluções solvente contendo triclosan e nipagin apresentaram $\lambda_{\text{máx}}$ em 280 nm e 252nm respectivamente. Linearidade entre a concentração tanto do triclosan quanto do nipagin e absorvância no intervalo de concentração investigado foi observada com R^2 igual a 0,09669 e 0,9744 respectivamente. O estudo da mistura por CLS proporcionou a obtenção dos espectros puros. Com teste de retorno variando de 90 a 104% para triclosan. A ED mostrou-se inicialmente inadequada para a determinação dos componentes desta mistura.

Conclusão: CLS é mais adequado que ED para quantificar triclosan na presença de nipagin no sabonete líquido formulado pela FEFQ-UCB.

Agradecimentos: Ao CNPq e à UCB pelo suporte financeiro.

Referências

- ERICKSON, B. E. Analysing the ignored environmental contaminants. **Environmental Science & Technology**. V.36 p 140-145, 2002
- FERREIRA, AO. **Guia Prático da Farmácia Magistral**. 4ª ed. São Paulo: Pharmabooks, 2010.
- USP 42 - N F37 2019 - **United States Pharmacopeia** - National Formulary 37, Publication Date: Nov 1, 2018.
- WEATHERLY LM, Gosse JA. **Triclosan exposure, transformation, and human health effects**. *J Toxicol Environ Health B Crit Rev*;20(8): pág 447-469. Publicado em Agosto, 2017

Caracterização de Microchip Eletroforético fabricado em vidro e resina foto-curável

João Vitor F. Paiva (IC) *, Gerson F. Duarte Jr. (PG), Wendell K. T. Coltro (PQ).
e-mail: joaoouvittor@gmail.com

Instituto de Química- Universidade Federal de Goiás, CEP 74690-900, Goiânia, GO.

Palavras-chave: Eletroforese, microfabricação, microchip, NOA.

Os processos convencionais para fabricação de dispositivos de vidro utilizam técnicas fotolitográficas seguidas por corrosão química e selagem térmica ou plasmática, o que limita a fabricação destes aos grandes centros com instrumentação sofisticada¹. A simplicidade instrumental na fabricação de dispositivos híbridos é um fator que os favorecem ante os sistemas convencionais de vidro. Neste contexto, surge o NOA (*Norland Optical Adhesive*), um polímero sensível à radiação ultravioleta (UV). Embora já tenha sido utilizado para fabricação de dispositivos microfluídicos, sua aplicação em separações eletroforéticas ainda não foi explorada.² Desta forma, este trabalho tem por objetivo a caracterização de microssistemas eletroforéticos (MSE) fabricados em vidro/NOA. Para tal, avaliou-se a compatibilidade do NOA com os solventes usualmente empregados em eletroforese (Figura 1) e a determinação da magnitude do fluxo eletrosmótico (EOF).

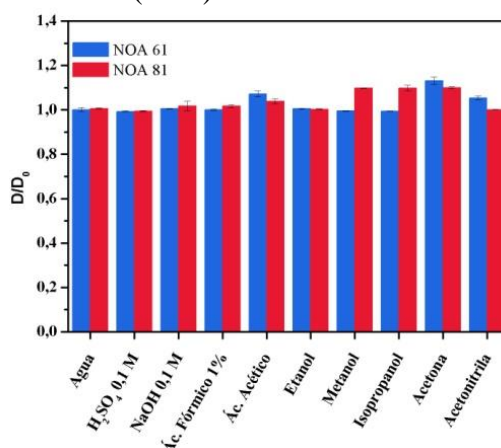


Figura 1 - Compatibilidade do NOA com solventes orgânicos e soluções ácidas e básicas baseadas na razão de intumescimento de discos (D/D₀) após 12 horas de exposição aos solventes e soluções.

A Figura 1 mostra os resultados obtidos para o NOA 61 e 81, na qual pode-se observar que ambos os materiais resistem bem à água, etanol e soluções ácidas e básicas, porém não resistem aos demais solventes orgânicos e ao ácido acético. A magnitude do EOF foi determinada através do método de monitoramento de corrente³ e os valores obtidos em pH igual a 6 foram $4,34 \times 10^{-4}$ e $3,87 \times 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ para o NOA 61 e NOA 81, respectivamente. As próximas etapas deste estudo visam avaliar o desempenho analítico do dispositivo para aplicações bioanalíticas.

Agradecimentos

CAPES/COFECUB, CNPq, FAPEG.

Referências

1. Coltro, W. K. T., et al. *Electrophoresis*, 29, 4928.
2. Kim, S.H., et al. *Advanced Functional Materials*, 17, 3493.
3. Xiaohua. Huang, et al. *Analytical Chemistry*, 60, 1837.

Comportamento térmico das misturas binárias do fármaco Rivaroxabana e os excipientes dióxido de silício coloidal e croscarmelose sódica.

Larissa G. Velasco (IC), Almir C. B. Junior (IC), Bruna de A. Costa (PG), Camila C. S. M. Brito (PG), Lucylene N. Matos (PG), Maria Inês G. Leles (PQ).

larissavelasco2012@gmail.com

LAMES – Laboratório de Método de Extração e Separação – Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Av. Esperança s/n. Campus Universitário, 74690-900, Goiânia, GO – Brasil

Palavras-chave: Rivaroxabana, Análise Térmica, Interações fármaco-excipiente, Croscarmelose Sódica, Dióxido de Silício Coloidal.

A Rivaroxabana (RIV) é um anticoagulante oral, utilizado no tratamento de tromboembolismo e embolia pulmonar no período pós-cirúrgico¹. A RIV inibe seletivamente o fator Xa, responsável pela reação em cascata da formação de trombina. Isto ocasiona o bloqueio da formação amplificada da trombina e conseqüentemente, reduz a coagulação sanguínea². Nas formulações de RIV usualmente contêm agentes desintegrantes como croscarmelose sódica (CS) e o dióxido de silício coloidal (SiO₂), que auxiliam na distribuição do medicamento no organismo³. Como as interações físicas e químicas entre fármaco e excipientes podem afetar a biodisponibilidade e estabilidade, é necessário realizar previamente o estudo das interações de cada mistura binária para que não comprometa a eficácia e segurança do medicamento resultante⁴. Nos últimos anos, as técnicas empregadas para este propósito são a Calorimetria Diferencial Exploratória (DSC) e a Termogravimetria (TGA/DTG)². Sendo assim, o presente trabalho consiste na avaliação da interação fármaco-excipiente nas misturas binária 1:1 (m/m) de RIV com CS e SiO₂, cedidas pela GeoLab Indústria Farmacêutica Ltda. As curvas TGA/DTG foram executadas em cadinho de α -Al₂O₃ e com variação de temperatura (ΔT) de 25-1000 °C, e as curvas DSC realizadas em cadinho de alumínio com tampa perfurada e ΔT de 25-300 °C. Ambas realizadas em 50,0 mL min⁻¹ de N₂, a 20 °C min⁻¹, nos equipamentos da Mettler Toledo, modelo TG/SDTA 851^o e DSC 822^o, respectivamente. A curva DSC de RIV apresenta apenas um pico endotérmico em 235 °C, correspondente a sua fusão, conforme a literatura². A curva DSC da CS mostra uma endoterma de 25 a 175 °C relacionada a desidratação, e a curva do SiO₂ evidencia estabilidade térmica até 300 °C. As curvas TGA/DTG corroboram com as respectivas curvas DSC. A partir do comportamento térmico das misturas binárias entre RIV e os excipientes estudados, percebe-se que não há indícios de interações entre fármaco e excipiente, uma vez que as curvas DSC de cada mistura binária exibiu o pico referente a fusão da RIV, além dos demais perfis semelhantes dos excipientes isolados.

Agradecimentos

LAMES/UFG, GeoLab Indústria Farmacêutica Ltda e FUNAPE.

Referências

1. Souri, E., et al., Acta Chromatographia, 2016, 28 (3), 347.
2. Ding, T., et al., J Therm Anal Calorim, 2017, 130, 1569.
3. Rowe, R. C., Sheskey, P. J., and Quinn, M. E., Handbook of pharmaceutical excipients. London. Chicago: Pharmaceutical Press, 2009, 6^a ed.
4. Lopes, M. S., et al., Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 2019. <https://doi.org/10.1007/s10973-019-09137-0>

Construção de um sistema portátil de aquecimento para amplificação de DNA voltadas para aplicações em diagnósticos no *point-of-care*

Marcio N. de Souza (IC)¹, Gabriela G. R. M. Duarte (PQ)¹. e-mail: *marcioj189@gmail*.

¹Instituto de Química da Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Goiás, Brasil, 74605450

Palavras-chave: LAMP, Arduino, microdispositivo, portátil.

Introdução: Um diagnóstico rápido de uma infecção causada por um vírus por exemplo, pode auxiliar para um tratamento adequado da doença além de controle epidemiológico. Em locais de difícil acesso ou com pouca infraestrutura, sistemas portáteis podem auxiliar na realização de testes laboratoriais. Dentre as diferentes formas de se detectar infecções virais, existem alguns métodos de detecção baseados na amplificação do ácido nucleico, dentre eles a amplificação isotérmica mediada por *loop* (LAMP) ganha destaque devido a simplicidade de execução, ao fato de ser realizada isotermicamente e por apresentar alta sensibilidade e especificidade¹. Para aplicações no *point-of-care*, se faz necessária a utilização de instrumentação compacta, de baixo custo e de fácil acesso, que possam realizar os testes laboratoriais diretamente o campo.

Objetivo: Este estudo visa desenvolver um sistema de aquecimento e de rotação integrados capaz de realizar todas as etapas da LAMP em microchips de poliéster-toner.

Metodologia: Este trabalho utiliza-se de uma placa Arduino e seus componentes, além de uma pastilha de Peltier, uma bateria recarregável de lítio para construir um dispositivo capaz de alcançar e manter a temperatura de ativação da enzima utilizada no teste (72 °C), e um rotor capaz de rotacionar o chip. **Resultados:** Foi possível obter um dispositivo simples, integrado e portátil capaz de promover o aquecimento bem como a mistura dos reagentes utilizados para a reação LAMP. **Conclusão:** O sistema de aquecimento e mistura desenvolvido neste trabalho apresenta elevado potencial para aplicações locais em situações de *point-of-care*.

Agradecimentos FAPEG, CNPQ

Referências

1. Notomi, T., Okayama, H., Masubuchi, H., Yonekawa, T., Watanabe, K., Amino, N., Hase, T. *Nucleic Acids Research*, Volume 28, Issue 12, 15 June 2000, Page e63.

Desenvolvimento de dispositivos eletroquímicos descartáveis para detecção de vitamina D.

Kamylla P. Venancio¹ (PG), Ana C. A. Ananias¹ (IC), Livia F. Sgobbi¹ (PQ). *E-mail:* kdepaula@live.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Avenida Esperança, s/n – Goiânia - GO - Brasil

Palavras-chave: Vitamina D, técnicas eletroquímicas, eletrodos descartáveis, estudos voltamétricos.

Entre os nutrientes requeridos para muitas funções fisiológicas essenciais para a vida estão as vitaminas.¹ A vitamina D, é um hormônio esteroide, cuja principal função consiste na regulação da homeostase do cálcio, formação e reabsorção óssea² e existe na forma de duas espécies, vitamina D₂ (Ergocalciferol), obtido através da alimentação, e a vitamina D₃ (Colecalciferol), obtida de forma endógena através da exposição a luz solar.³ Estudos têm demonstrado uma relação entre a deficiência de vitamina D e a prevalência de algumas doenças autoimunes, entre outras.⁴ Devido a necessidade de se monitorar o nível de vitamina D no organismo, a demanda por exames laboratoriais tem crescido. Entretanto, os métodos utilizados além de serem de alto custo e demandarem um longo período de análise, apresentam resultados discrepantes, conferindo então, menores confiabilidade, e maior variabilidade das análises. A busca por métodos alternativos que visem o baixo custo da análise, e a obtenção de resultados mais rápidos e precisos encontra nas técnicas eletroquímicas características como sensibilidade elevada, limite de detecção baixo, tempo de análise reduzido. O presente trabalho tem como objetivo desenvolver uma plataforma de sensoriamento eletroquímico descartável e de baixo custo para detecção de vitamina D. Devido à baixa solubilidade da vitamina D em meio aquoso e às limitações dos eletrodos impressos na presença de solventes orgânicos, foi necessário otimizar o preparo da solução de vitamina, considerando os diferentes solventes (etanol, acetona, acetonitrila, dimetilsulfóxido, dimetilformamida) e diferentes eletrólitos suporte (cloreto de potássio, perclorato de sódio, perclorato de lítio). Os solventes que danificaram a superfície eletródica foram descartados. O comportamento eletroquímico do analito foi investigado pelas técnicas de voltametria cíclica, onde foi observado um pico de oxidação em +0,9 V em perclorato de sódio 0,1 M contendo 60% de etanol. A superfície eletródica será modificada com materiais derivados de carbono, como nanotubo de carbono e grafeno para aumentar a sensibilidade do sensor. Técnicas de voltametria de pulso e de onda quadrada serão utilizadas para otimização da resposta analítica na presença da vitamina D e as figuras de mérito serão obtidas, como limites de detecção e quantificação, sensibilidade, reprodutibilidade e repetibilidade. Até o presente momento, os resultados se mostraram promissores, uma vez que sensores eletroquímicos descartáveis para detecção de vitamina D não foram reportados.

Agradecimentos:

CAPES

Referências

1. Jakobsen, J. & Jäpelt, R. B., *Handbook of Analysis of Active Compounds in Functional Foods*, 2012.
2. Arnson, Y., Amital, H. & Shoenfeld, Y., *Ann. Rheum*, 2007, 66, 1137.
3. Cincotto, F. H., Canevari, T. C. & Machado, S. A. S., *Electroanalysis*, 2017, 2783
4. Marques, C. D. L., Dantas, A. T., Fragoso, T. S. & Duarte, Â. L. B. P., *Rev. Bras. Reumatol*, 2010, 50, 60.

Desenvolvimento de metodologias simplificadas de extrações de agroquímicos em alimentos e solo para a detecção via LC-QTOF-MS

Rafael O. Martins^{1*} (PG), Carla Freitas¹ (PQ), Daniel A. Soares¹ (PG), Rosineide C. Simas¹ (PQ), Boniek G. Vaz¹ (PQ), Andréa R. Chaves¹ (PQ), *rafaelom144@gmail.com*

¹ Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Av. Esperança, s/n - Chácara de Recreio Samambaia, Goiânia - GO, 74690-900, Brasil, *rafaelom144@gmail.com*

Palavras-chave: Agroquímicos, HPLC, Arroz, Milho, Solo

Agroquímicos podem ser definidos como compostos químicos utilizados na agricultura para aumentar o rendimento da produção de determinada plantação. Estes têm sido utilizados para procedimentos como: promoção do crescimento de culturas, fertilização e combate à praga (inseticidas, herbicidas, fungicidas, etc.)¹. Contudo, a utilização excessiva e contínua pode agredir diretamente os seres vivos² além de ocasionar a infertilidade de áreas para novos plantios, e acúmulo de resíduos destes compostos químicos no meio ambiente.

Estudos sobre os efeitos dos resíduos de agroquímicos no meio ambiente conduzem à determinação de limites mínimos de manipulação e resíduos remanescentes. Assim, os órgãos fiscalizadores trabalham para monitorar o cumprimento destes limites². Em termos gerais, coletas de amostras são executadas periodicamente e enviadas à laboratórios credenciados para verificação. A técnica comumente empregada tem sido a cromatografia líquida acoplada a detectores UV ou espectrômetros de massas (MS). Para tanto, a etapa de preparo de amostras normalmente utilizada apresenta-se como etapa mais laboriosa da análise, pois em geral, envolve várias etapas, as quais podem adicionar erro e contaminação às medidas. Sendo assim, há uma demanda urgente e necessária para o desenvolvimento de métodos de alta sensibilidade e baixo custo para controle e determinação de agroquímicos em amostras de alimentos. Desta forma, este trabalho propõe o desenvolvimento de metodologias de extrações simplificadas para a determinação de agroquímicos em amostras de arroz, milho e solo.

As amostras de milho, solo e arroz foram coletadas e submetidas à adição de padrões certificados de pesticidas em concentrações controladas e submetidas aos procedimentos de preparo de amostras: extração por sólidos dispersivos, SPE e líquido-líquido. Segundo resultados a fase C18 foi o mais eficiente para retenção de açúcares presentes nas matrizes vegetais. Polímeros molecularmente impressos (MIP) reversos para aumentar a eficiência da extração foram sintetizados e avaliados para remoção de açúcares presentes na amostra. Para amostra de solo, a extração líquido-líquido tamponada demonstrou-se mais eficiente para retenção de interferentes das matrizes. O procedimento permitiu realizar a detecção de 12 pesticidas via HPLC-QTOF-MS. O método demonstrou linearidade e precisão para determinações de resíduos em partes por bilhão (ppb), podendo apresentar-se como alternativa aos métodos utilizados atualmente.

Agradecimentos

UFG, CAPES, CNPQ

Referências

1. Ferreira, V. B., *et al.* Estimativa de ingestão de agrotóxicos organofosforados pelo consumo de frutas e hortaliças, 2018. 26, p. 216-221.
2. Teixeira, C. S. C. A., *et al.* Photo-fenton remediation of wastewaters containing agrochemicals. 2005, 48, p. 207-218.

Desenvolvimento de sensor eletroquímico de carbono vítreo modificado com éter coroa para determinação de 17 β -estradiol em água de abastecimento

Felipe B. Arantes¹ (IC)*, Pedro V. V. Romanholo¹ (PG), Juvenal C. S. Filho¹ (PQ), Livia F. Sgobbi¹ (PQ). *felipeb.arantes@gmail.com*

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, 74690-900, Goiânia – GO, Brasil.

Palavras-chave: sensores, eletroquímica, água de abastecimento, éter de coroa, hormônio.

A determinação de diversos poluentes emergentes naturais e sintéticos, que podem estar presentes em águas naturais em concentrações na faixa de pg L⁻¹ a ng L⁻¹, é ainda um grande desafio. Entre eles, o hormônio 17 β -estradiol é comumente encontrado em águas de abastecimento, uma vez que os atuais processos de tratamento de afluentes são incapazes de removê-los por completo. O monitoramento dessa substância se faz necessário, pois sua presença pode causar danos à saúde humana e ao meio ambiente.¹ Neste sentido, o uso de sensores eletroquímicos se apresenta como uma alternativa às técnicas mais convencionais de detecção e de maior custo, tais como os cromatógrafos.² O estudo aqui apresentado busca desenvolver sensores baseados em modelos que mimetizam enzimas naturais utilizando uma classe de compostos cíclicos que podem complexar íons e moléculas chamados de éter coroa.³ O objetivo consiste em estudar o comportamento do éter coroa em relação à sua interação com o 17 β -estradiol após sua imobilização na superfície eletrodica. O desenvolvimento de um sensor eletroquímico seria uma alternativa para reduzir tempo e custo de análise.³ A partir de estudos preliminares, já foi possível prever que a modificação da superfície do eletrodo de trabalho com nanotubo de carbono é uma das formas de fazer com que o éter coroa interaja melhor com o hormônio, pois ocorre um aumento na área eletroativa e provável adsorção do éter coroa. Primeiramente, avaliou-se o comportamento eletroquímico do hormônio utilizando-se o eletrodo de carbono vítreo (GC) não modificado. Posteriormente, utilizou-se o eletrodo modificado com nanotubo de carbono, seguido pelo eletrodo modificado apenas com o éter coroa, e por fim, o eletrodo de carbono vítreo modificado com nanotubo de carbono/éter coroa. O hormônio apresentou um pico de oxidação em torno de +0,66 V na superfície do GC e em torno de +0,62 V no eletrodo modificado com nanotubo de carbono. Além disso, houve um aumento de 43 vezes na intensidade da corrente de pico. Os ensaios com o éter coroa ainda precisam ser otimizados em relação ao tempo de incubação com o hormônio e o tipo de imobilização ao nanotubo. Espera-se ao fim do processo obter um sensor eletroquímico de baixo custo, simples, rápido e sensível para detecção do hormônio 17 β -estradiol em água de abastecimento.

Agradecimentos

CNPq.

Referências

1. Bila, D. M.; Dezotti, M.; Química Nova, 2007, 30, 651.
2. Moraes FC, Rossi B, Donatoni MC, de Oliveira KT, Pereira EC. Anal.Chim.Acta 2015, 881, 37.
3. Dong, Z.; Luo, Q.; Liu, J. C.S. Reviews, 2012, 41, 7890.

DESENVOLVIMENTO DE UM MÉTODO DE MICROEXTRAÇÃO ASSISTIDA POR AR PARA ADSORÇÃO DE ÍONS Cd^{2+} UTILIZANDO PÓ DE CAFÉ MAGNETIZADO

Jussara dos S. Muniz¹ (PG)*, Vanessa N. Alves¹ (PQ)

¹Universidades Federal de Goiás – Regional Catalão, Unidade Acadêmica Especial de Química, Catalão-GO, Brasil, 75704-020. *jussara-dossantos@hotmail.com

Palavras-chave: Adsorvente, Cádmio, Adsorção, Pó de Café, microextração.

Os íons metálicos são compostos não-biodegradáveis, e que podem ser absorvidos no meio ambiente e penetrar no organismo dos seres vivos, ocasionando sérios riscos, que muitas vezes acabam sendo letais¹. Deste modo, técnicas de microextração combinadas à espectrometria de absorção atômica com chama (FAAS) vem sendo empregadas com sucesso na determinação de íons metálicos mesmo em quantidades traço, visando contribuir com o desenvolvimento da química verde². Portanto, este trabalho tem como objetivo desenvolver uma metodologia de microextração dispersiva assistida por ar, utilizando o pó de café magnetizado como material adsorvente, para adsorção de íons metálicos (Cd^{2+}).

O pó de café utilizado foi obtido a partir de cápsulas descartáveis de café. Foi inicialmente lavado com água deionizada sob agitação por 30 minutos e posteriormente seco em temperatura ambiente. Para o procedimento de magnetização, 15g do pó de café foram colocados sob agitação por 1 hora com 150 mL de metanol e 30 mL de ferro líquido previamente sintetizado. A mistura foi filtrada, lavada com metanol e seca à temperatura ambiente. Para os ensaios de adsorção, foi preparada uma solução de Cd^{2+} 1,0 mg L⁻¹ e o pH que é um parâmetro que afeta a adsorção foi avaliado nos valores de 3 a 9. Alíquotas dessa solução foram colocadas em contato com 50 mg do pó de café magnetizado, agitadas no vórtex por 10 min, e posteriormente o adsorvente foi separado com um ímã e o sobrenadante analisado por espectroscopia de absorção atômica com chama (FAAS). De acordo com a avaliação do ponto de carga zero do material adsorvente obtido após magnetização, em pH 4,5 a superfície do material adsorvente se encontra neutra, e em valores de pH maiores que 4,5, a superfície estará carregada predominantemente na forma negativa e irá adsorver preferencialmente cátions.

Assim, para o íon analisado, na faixa de pH de 6 a 9 não foi observada diferença significativa na porcentagem de adsorção, tendo sido o pH 7 selecionado para os estudos posteriores, apresentando uma adsorção de 83,2%. Para o procedimento de microextração dispersiva assistida por ar, foi utilizada uma bomba de aquário para inserção de ar, promovendo a agitação e contato da fase sólida com a amostra. As condições de extração (massa de adsorvente e tempo de adsorção) foram otimizadas pelo método multivariado, através da construção de uma matriz Doehlert. A superfície de resposta obtida foi caracterizada como um ponto de sela, entretanto após análise de variância não foi observada falta de ajuste e o gráfico de curvas de nível foi utilizado para avaliação das regiões de ótimo, sendo que melhores condições de adsorção são obtidas com a utilização de massas de adsorvente elevadas, bem como maiores tempos de agitação, os valores adotados foram 42,5 mg e 16 minutos.

Neste contexto pode-se concluir que a técnica de microextração dispersiva assistida por ar empregando uma bomba de aquário utilizando o pó de café magnetizado como material adsorvente vem apresentando resultados promissores no processo de adsorção do íon Cd^{2+} , contribuindo para o desenvolvimento de metodologias analíticas limpas.

Agradecimentos: UFG/RC, UFU, CAPES, CNPq, FAPEG

Referências

1. COQUEIRO, J. F. R. Gestão de resíduos de serviços de saúde: estudo de caso no hospital municipal Esaú Matos, Vitória da Conquista, Bahia. 2016, 150 f. Dissertação (Mestrado em Planejamento Ambiental) – Universidade Católica de Salvador, Salvador, 2016.
2. BRANDÃO, P. C. Avaliação do uso do bagaço de cana como adsorvente para a remoção de contaminantes, derivados do petróleo, de efluentes. 2006. 147 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2006.

Desenvolvimento de uma metodologia HPLC-MS para a análise de ácido cítrico e oxálico em amostras de urina animal

Allyster R. Silva¹ (IC), Rafael O. Martins¹ (PG), Rosineide C. Simas¹ (PQ), Veridiane R. Gomes¹(PG), Maria C. S. Fioravanti¹ (PQ), Andréa R. Chaves¹ (PQ)

E-mail: Allyster_.silva@hotmail.com

1 Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Av. Esperança, s/n - Chácara de Recreio Samambaia, Goiânia - GO, 74690-900, Brasil,

Palavras-chave: HPLC-MS, Ácido oxálico, Ácido cítrico, Urina

A urolitíase é uma doença extremamente comum, sendo a terceira doença urinária que mais afeta os seres humanos. No entanto, esta doença também pode afetar animais, como cães e gatos. O mecanismo de formação de cálculos envolve a saturação excessiva no meio urinário, subsequentemente a precipitação, crescimento e finalmente a agregação desses cristais, causando sua retenção nos nódulos urinários¹. As hiperoxalurias refere-se à excreção urinária de uma quantidade superior a 40-45 mg/dia de oxalato. O excesso do oxalato interage com o cálcio formando oxalato de cálcio o qual é comumente referido como “pedra nos rins”¹. Neste contexto, o citrato presente na urina forma complexos solúveis com o cálcio; ocasionando uma diminuição da supersaturação de oxalato de cálcio e fosfato de cálcio presente no sistema urinário, atuando na inibição da formação de oxalato de cálcio, sendo importante indicador para a urolitíase¹. A determinação precoce e controle das concentrações de citrato e oxalato possibilita o tratamento rápido com menor sofrimento ao paciente. Sendo assim, este trabalho objetiva o desenvolvimento de uma metodologia HPLC-MS para a análise de ácido oxálico e cítrico em amostras de urina de cães e gatos. Para o presente estudo as condições cromatográficas e de extração foram otimizadas.

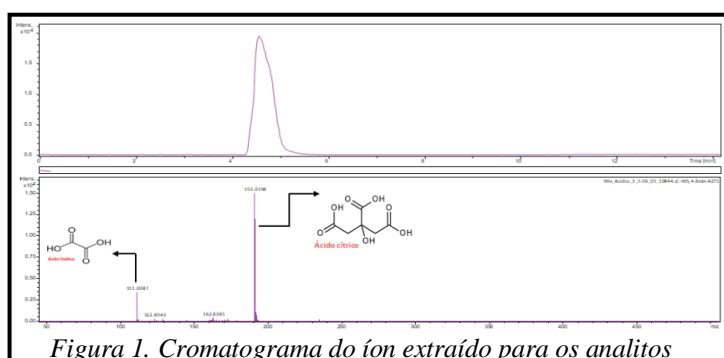


Figura 1. Cromatograma do íon extraído para os analitos

Para a avaliação do método, inicialmente trabalhou-se com os padrões dos ácidos estudados, em soluções de 500 mg L⁻¹. A análise cromatográfica consistiu em Fase A: Água Fase B: Metanol, onde foi realizada sob condição isocrático (60% B e 40% A), sob temperatura de 30°C. O método se mostrou eficiente para a detecção dos

analitos, como mostra na Figura 1. Em etapa futura o método desenvolvido será aplicado no estudo clínico para análise urológica em cães e gatos.

Agradecimentos

CAPES, CNPQ, LaCEM

Referências

1. Madueno, I. O., Cámara, F. J. I., Martínez, M. J. T., Gonzáles, M. C. D., Fernández, M. A., Development and validation of an HPLC-MS method for a simultaneous measurement of oxalate and citrate in urine, 2016, v.9, p. 93-97.

Desenvolvimento e aceitação de bebidas a partir de extratos hidrossolúveis

Natan L. Ribeiro¹ (IC), Thábita E. Mota¹ (IC), Rafaella G. Mikaele L. S. Santos¹ (IC), Santos¹ (IC), Jéssica Cornélio¹ (IC), Mariana C. J. dos Santos¹ (IC) Kelly N, Marra¹ (PQ).
natanluz86@gmail.com

¹Universidade Estadual de Goiás – Câmpus de Ciências Exatas e Tecnológicas Henrique Santillo, BR 153, 3105 – Fazenda Barro do Meio, 75132-903, Anápolis-GO, Brasil, *natanluz86@gmail.com

Palavras-chave: Leites vegetais, Intolerância alimentar, Alternativa alimentar, Análises Sensoriais.

O trabalho apresentado se trata do desenvolvimento e análise sensorial de extratos vegetais voltados a pessoas com intolerância ou alergia a produtos lácteos. Foram realizadas análises físico-químicas, cujos resultados podem ser vistos na Tabela 1

Tabela 1: Composição dos extratos hidrossolúveis. Matérias-primas usadas: Amêndoas (EA), Baru (EB), Castanha do Brasil (CB), Castanha de Caju (ECC), Grão de Bico (EGB), e Quinoa (EQ)

Nutriente (g 100g ⁻¹)	Extratos					
	EA	EB	ECB	ECC	EGB	EQ
Umidade ¹	91,1 ± 0,018	78,1 ± 0,01	87,8 ± 0,0	92,4 ± 0,0	93,0 ± 0,0	91,9 ± 0,0
Proteínas ¹	0,681	5,05	0,425	0,4	1,88	0,531
Carboidratos totais ¹	0,78±0,15	2,53±0,17	0,41±0,06	0,66±0,0,23	1,45±0,68	1,07±0,30

Após as análises, foram preparadas duas bebidas energéticas. A primeira foi preparada na proporção 3:3:4 de grão de bico², baru³ e castanha do Brasil⁴. Na segunda, foram usados os extratos de amêndoas⁵ quinoa⁶ e castanha de caju⁷, na proporção 4:3:3. Foram realizados testes sensoriais na Universidade Estadual de Goiás - CCET, sendo que 91 pessoas provaram a bebida 1 e 88 pessoas provaram a bebida 2.

Quanto a impressão global da bebida 1, 51% das pessoas, apresentaram opiniões positivas sobre a bebida. Quanto a bebida 2, 68% das 88 pessoas que a experimentaram gostaram da bebida.

Foi notado que para ambas as bebidas houve um alto nível de aceitação, sendo destacados alguns pontos de melhoria, como ressaltar o sabor doce nas bebidas e adicionar algum outro saborizante. Mas de modo geral, ambas são uma ótima alternativa para pessoas com alergia ou intolerância a produtos lácteos.

Referências

1. ALCÂNTARA, V. Caracterização Química de Extratos Hidrossolúveis Vegetais, Trabalho de Conclusão de Curso (monografia) – Curso de Química Industrial, Universidade Estadual de Goiás, Anápolis, Goiás, 2015.
2. MAYER, K.L., KURTZ, A. Produção e caracterização do extrato hidrossolúvel de grão de bico adicionado de cacau, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, 2014.
3. D'OLIVEIRA, A.C. Desenvolvimento de bebida aromatizada de amêndoa de baru (*Dipteryx alata* Vog.), Universidade Federal do Mato Grosso do Sul, 2015.
4. FELBERG, I. *et al.* Araraquara, 2004, V.15, n.2, p.163.
5. PINHEIRO, R. Tese, 2013, 103f.
6. BICUDO, M. *et al.* B. CEPPA, 2012, V.30, n.1, p.19.
7. MORAIS, A., FREITAS, H., CAVALCANTE, E. CONNEPI, 2010.

Detecção colorimétrica de nitrito em dispositivos analíticos fabricados em papel.

Luisa F. C. Ribeiro¹(IC)*, Mauricio M. L. Pereira²(IC), Lucas R. de Sousa(PG)³, Wendell K. T. Coltro²(PQ). E-mail: lulu_fcr@hotmail.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, GO, Brasil.

²Departamento de Química Analítica, Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil.

Palavras-chaves: colorimétrica, PADs, nitrito, papel e reação de Griess

Este trabalho tem por objetivo apresentar uma metodologia da fabricação de PADs em forma de spot tests para otimização dos parâmetros reacionais para detecção colorimétrica de nitrito utilizando a reação de Griess. A reação de Griess consiste na reação entre sulfanilamida sob condições ácidas e nitrito que forma um sal de diazônio que ao reagir com cloridrato de N-(1-naftil)etilenodiamina (NED) gera um diazo composto de coloração magenta. Por fim, os resultados desse trabalho será comparado com outro sistema alternativo com intuito de comparação das metodologias de análises. Dentre os métodos de detecção que podem ser acoplados aos PADs, o método colorimétrico é um dos mais utilizados, sendo a técnica de detecção pioneira na abordagem do uso de dispositivos de papel. A fabricação dos PADs nesse trabalho foi realizado através da impressão a cera como proposto na literatura². Foram realizadas as otimizações de alguns parâmetros de fabricação dos dispositivos e das condições de reações. O primeiro parâmetro otimizado foi o tamanho das microzonas que consiste na variação do diâmetro de 1 mm até 10 mm, foram selecionados os tamanhos 3 mm, 4 mm e 5 mm por possuir um melhor desempenho qualitativo na formação de cor. Em seguida, o volume nos spots, foram aplicadas alíquotas sucessivas de 0,5 µL até 2,0 µL de corante em spot test com 3,4 e 5 mm de diâmetro. Com esse ensaio, foi utilizada zonas de 5mm de diâmetro com 1 µL de volume de reagentes. Para encontrar a concentração ideal foi feita uma variação da concentração dos reagentes cromógenos, sulfanilamida (5 µmol/L – 75 µmol/L) e de NED (2 µmol/L – 6 µmol/L) com solução padrão de nitrito. Com esse experimento a concentração ótima dos reagentes cromógenos para análise de nitrito nos PADs é 5 µmol/L NED com 50 µmol/L de sulfanilamida. Adiante, foi realizado o ensaio com pH definido na faixa de 5-11, na qual resultou que a reação de Griess precisa ser realizada em condições ácidas, pois com o aumento do pH e à diminuição da intensidade de cor dos spots. Por fim, foi avaliando a intensidade de cor dos mesmo spots em diferentes intervalos de tempo. Acoplando os dois resultados da otimização do tempo, foi possível concluir que as capturas de imagens podem ser realizadas entre 0 até 10 minutos após a secagem das amostras para melhores repostas qualitativas. Para a detecção colorimétrica foram usados dois dispositivos eletrônicos sendo eles, câmera de celular e scanner de bancada.



Figura 1: Representação da fabricação dos spot test.

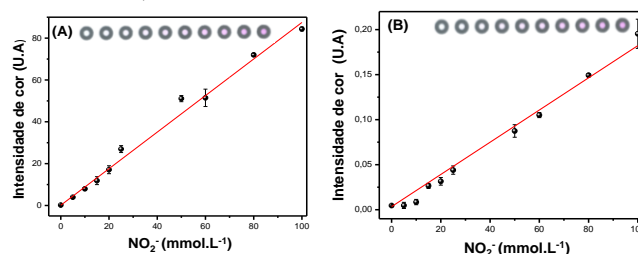


Figura 2: Curva analítica para cada equipamento eletrônico avaliado (A) Scanner e (B) aplicativo Photometrix.

Avaliando as curvas de calibração para os dois ensaios realizados constata-se a sensibilidade analítica obtida foi de perante a detecção colorimétrica de nitrito, sendo 0,873 (UA µM⁻¹) utilizando um scanner para capturar e 0,00179 (UA µM⁻¹) utilizando um smartphone para captura e análise. Os resultados do limite de detecção alcançados pelos scanner e pelo smartphone foram 0,3 µM e 1,1 µM, respectivamente.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPEG e INCTBio.

Referências

1. Wang Bo, Lin Zhiqiang Chemical Education, 2015.
2. Cate, D. M., et al, Anal. Chem. 2015 87, 19-43.

Deteção de zika vírus por amplificação isotérmica de DNA mediada por *loop* em microdispositivos descartáveis de poliéster-toner diretamente em amostras de sangue total, soro, urina e saliva

Geovana M. Mendes^{1*} (PG) (geovanamelomendes@gmail.com), Paulo F. N. Estrela¹ (PG), Kézia G. Oliveira¹ (PG), Alexandre M. Bailão² (PQ), Nilson A. Assunção³ (PQ), Gabriela R. M. Duarte¹ (PQ).

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás.

²Instituto de Ciências Biológicas, Universidade Federal de Goiás.

³Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas, Universidade Federal de São Paulo.

Palavras-chave: RT-LAMP, microdispositivos de PeT, zika, *point-of-care*.

Infecções por arbovírus, como zika, dengue, e chikungunya, apresentam sobreposição de sintomas clínicos e de distribuição geográfica. Portanto, um diagnóstico baseado somente nas informações clínicas se torna bastante comprometido, necessitando então de ferramentas laboratoriais eficientes para um diagnóstico diferencial, confiável e preciso. Contudo, a incidência desses vírus é majoritariamente em locais onde os recursos são escassos e nem sempre existe uma infraestrutura laboratorial sofisticada¹. Assim sendo, neste trabalho foi proposto uma metodologia simples, rápida e precisa para detectar o zika vírus (ZIKV) diretamente em amostras complexas, através de uma reação de transcrição reversa seguida da amplificação isotérmica de DNA mediada por *loop* (RT-LAMP) em microdispositivos descartáveis de poliéster-toner (PeT). Cinco microlitros da mistura reacional foram inseridos na microchip e a solução foi aquecida a 72 °C com o auxílio de um termobloco. Os resultados mostraram que foi possível detectar o ZIKV nos dispositivos microfluídicos de poliéster-toner em amostras reais de sangue total, soro, urina e saliva. Os ensaios foram realizados utilizando tanto amostras brutas (não processadas) quanto amostras de RNA pré-purificado e os resultados obtidos tanto pela eletroforese em gel de agarose quanto pela detecção visual mostram o sucesso da reação com apenas 10 minutos de incubação. A detecção do ZIKV diretamente em amostras de saliva e urina torna a metodologia ainda mais atraente, pois estas amostras apresentam grande potencial para aplicações em locais remotos sem instalações médicas e em ambientes comunitários para fins de vigilância e epidemiologia. Ainda, por serem facilmente coletadas, sem a necessidade de métodos invasivos, podem ser aplicadas por exemplo para coleta de amostras de crianças pequenas e recém-nascidos com mais facilidade². Portanto, o ensaio de RT-LAMP desenvolvido neste trabalho se mostrou uma ferramenta valiosa para aplicações em situações de *point-of-care*, haja vista que as reações podem ser realizadas diretamente em amostras complexas, sem a necessidade processar as amostras, coletadas imediatamente após o início dos sintomas e no próprio local de origem permitindo o diagnóstico nos estágios iniciais da infecção, quando os testes sorológicos ainda apresentam-se negativos.

Agradecimentos:

FAPEG, CNPQ

Referências

¹Pianka K., Rothman, A. e Tripathi, A., Technology, 2017, vol. 5, 115.

²Wong D. T., The Journal of the American Dental Association, 2006, vol. 137, 313.

Detecção molecular colorimétrica do Carlavírus em amostras de feijão com smartphone

Paulo F. N. Estrela* (PG)¹, Josias C. de Faria (PQ)², Thiago L. P. O. de Souza (PQ)², Claudio Brondani (PQ)², Rosana P. Vianello (PQ)², Gabriela R. M. Duarte (PQ)¹. paulofne@hotmail.com.

¹Instituto de Química da Universidade Federal de Goiás

²Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária, unidade Arroz e Feijão.

Palavras-chave: Diagnóstico Molecular, Smartphone, LAMP, Carlavírus.

A agricultura convencionalmente realiza o diagnóstico de doenças no campo mediante sintomas característicos apresentados pelas plantas infectadas¹. No entanto, o diagnóstico é dificultado quando patógenos distintos apresentam sintomas semelhantes, como no caso dos vírus *Bean Golden Mosaic Virus* (BGMV) e o Carlavírus². Nestes casos, recorre-se a técnicas laboratoriais que permitem afirmar com exatidão o agente causador da doença. Entretanto, o diagnóstico molecular padrão por Reação em Cadeia da Polimerase e separação eletroforética em gel demanda elevado custo, capacitação em instrumentação e longo tempo para obtenção do resultado final. Nesta perspectiva, este trabalho tem por objetivo a detecção do Carlavírus em amostras de feijão, mantendo a confiabilidade do diagnóstico molecular, no entanto, tornando-o mais simples e rápido, por meio da amplificação isotérmica do ácido nucleico via LAMP (Loop mediated isothermal amplification) e detecção visual utilizando smartphone e software de quantificação ImageJ. A metodologia do diagnóstico consiste em adicionar em um microtubo todos os reagentes necessários à transcrição reversa e Amplificação Isotérmica Mediada por Loop para o Carlavírus nas concentrações otimizadas, juntamente com a amostra de RNA extraído e purificado da planta com suspeita sintomatológica. O mix é aquecido à 72°C em banho seco e ao término do período de incubação é adicionado o reente intercalador de DNA e exposto a luz UV. A mudança de coloração da solução de alaranjada para verde fluorescente indica qualitativamente a presença do vírus na amostra, a qual pode ser semi-quantificada por meio da aquisição de imagem via smartphone e análise no software imageJ, conforme Figura 1. Inicialmente determinou-se o tempo de incubação e foi observado que 15 minutos de reação são suficientes para geração de produtos de amplificação necessários para detecção visual. Posteriormente, realizou-se a otimização das concentrações dos reagentes utilizados na amplificação via LAMP e construção da curva analítica. A reação demonstrou elevada sensibilidade ao detectar 10⁸ cópias de RNA. Ademais a reação apresentou elevada especificidade ao detectar apenas o Carlavírus, não apresentando reação cruzada com o BGMV, demonstrando elevado potencial para diagnóstico molecular instrumentalmente simples e rápido.

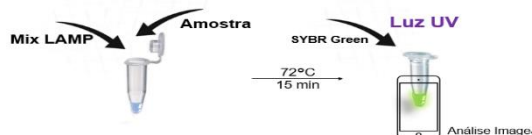


Figura 1- Esquema metodológico para detecção do Carlavírus.

Agradecimentos

EMBRAPA/Projeto SEG 23.16.04.042.00.00; CNPq

Referências

1. Chaves, A. L. R. *Biológico*, São Paulo, v.64, n.2, p.217-219, jul./dez., 2002.
2. Embrapa. *Secretária de Comunicação. Nota Técnica sobre o Carlavírus*. Brasília, DF, 2014.

Detecção rápida do vírus da chikungunya (CHIKV) baseada em amplificação isotérmica de DNA em microdispositivos descartáveis de poliestireno-toner

Kézia G. de Oliveira¹ (PG), Gabriela R. M. Duarte¹ (PQ).
e-mail: oliveirakg2@outlook.com

¹ Instituto de Química da Universidade Federal de Goiás, Goiânia, GO.

Palavras-chave: LAMP, poliestireno-toner, Chikungunya.

De acordo com a Secretaria Estadual de Saúde (Sesau), no Brasil, os casos de infecção por chikungunya aumentaram 680% no período de janeiro a outubro de 2019, em relação ao mesmo período do ano anterior (2018). Desde a introdução da doença nas Américas, a infecção pelo vírus chikungunya (CHIKV) tem se tornado preocupante devido a sintomas como febre aguda e poliartralgias graves e em muitos casos debilitantes¹. O tratamento adequado da doença e a vigilância epidemiológica do vírus dependem de análises laboratoriais rápidas e precisas. No campo de diagnóstico, um dos testes mais confiáveis e precisos para identificação do CHIKV tem sido a detecção molecular². Nesse sentido, este trabalho teve como objetivo detectar o CHIKV em um dispositivo descartável de poliestireno-toner (PS-T) através da amplificação isotérmica de DNA mediada por loop (LAMP). O sistema proposto foi capaz de demonstrar o resultado final em aproximadamente 12 minutos, incluindo amplificação e detecção do alvo em um dispositivo com capacidade de 5 µL. A leitura do resultado para detecção do CHIKV foi realizada diretamente na câmara de reação do dispositivo (detecção *on-chip*) apresentando uma fácil leitura. A detecção visual dispensa a necessidade de uma etapa adicional de separação dos fragmentos amplificados (eletroforese), o que proporciona que o resultado final seja obtido mais rapidamente. Os resultados baseados em fluorescência foram visualizados *on-chip*, diferenciando os resultados positivos (presença de fluorescência) dos negativos (ausência de fluorescência) através da interação entre o intercalador fluorescente de DNA (SYBR Green) e as moléculas de DNA formadas pós-amplificação. A metodologia para detecção do CHIKV demonstrou a alta especificidade (100%), demonstrada através da inserção de amostras de dois outros vírus intimamente relacionados (zika e dengue) também transmitidos pelo artrópode hematófago *Aedes aegypti* infectado. Em nenhum dos casos a reação apresentou positividade para outro vírus que não o CHIKV. Nessa perspectiva, o microdispositivo de PS-T aliado a técnica molecular LAMP, demonstrou uma grande potencialidade para o diagnóstico da infecção por CHIKV, proporcionando diagnósticos completos e específicos com pouco mais que 10 minutos, o que pode futuramente cooperar para realização de diagnósticos em ambientes remotos que detêm pouca infraestrutura.

Agradecimentos

FAPEG, CAPES.

Referências

1. Staples, J.E., Breiman, R.F., Powers, A. M. Clinical Infectious Diseases, 2009, 49, 942.
2. Dapurkar, D., Telang, M. Acta tropica, 2019, 199, UNSP 105131.

Determinação de agrotóxicos em água utilizando microextração por sorvente empacotado e HPLC-UV

Wagner A. de Oliveira Júnior¹ (IC)*, Silvia de S. Freitas¹ (PQ).
wagner.aires@hotmail.com

¹Universidade Federal de Goiás – Regional Catalão, Catalão – GO, Brasil, CEP - 75704-020

Palavras-chave: MEPS, HPLC, Agrotóxicos, iprodione, tebuconazol

Este estudo avalia o uso da técnica de microextração por sorvente empacotado (*microextraction by packed sorbent*, MEPS) para extração e pré-concentração dos agrotóxicos iprodione e tebuconazol de amostras de água e determinação por HPLC-UV. Dispositivos MEPS contendo cerca de 5 mg de sorvente foram utilizados nos experimentos. Os sorventes avaliados foram: florissil, sílica-gel 60, PSA (amina primária secundária), CN (ciano), C18 e C8. O dispositivo MEPS é formado por 3 partes desmontáveis (base, corpo e uma tampa) de politetrafluoretileno e 2 filtros de aço inoxidável porosos, acoplados a uma microseringa de agulha removível (HAMILTON, 500 μL). Os experimentos foram feitos em triplicata para cada sorvente, usando amostra de água fortificada com os agrotóxicos a $1,0 \text{ mgL}^{-1}$ e consistiram das seguintes etapas: (1) limpeza do sorvente (300 μL de acetonitrila, 2 vezes); (2) condicionamento do sorvente (300 μL de água deionizada, 2 vezes); (3) carregamento da amostra (300 μL aspirados e descartados (5 vezes); (4) eluição dos analitos em 50 μL de acetonitrila. Os analitos eluídos foram analisados em HPLC-UV (coluna e pré-coluna C8, fase móvel: metanol/água, 70:30 (v/v), vazão 1 mLmin^{-1} , $\lambda = 220 \text{ nm}$). O desempenho de cada sorvente foi avaliado através do fator de concentração (FC) do agrotóxico (área após a extração/área antes da extração). Os resultados são apresentados na figura 1.

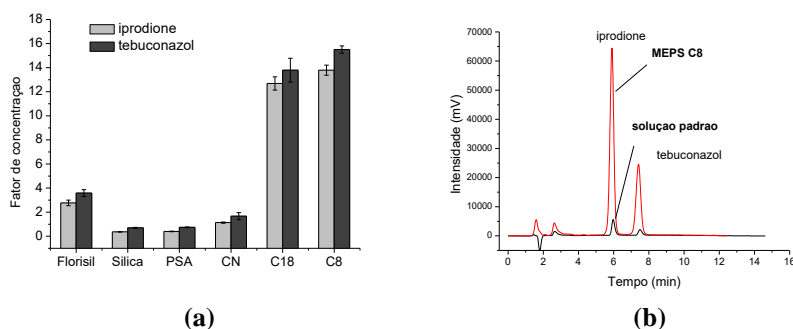


Figura 1. (a) Fator de concentração médio ($n=3$) dos agrotóxicos usando MEPS com diferentes sorventes; (b) Cromatogramas dos compostos iprodione ($t_R = 5,97 \text{ min}$) e tebuconazol ($t_R = 7,49 \text{ min}$) na solução padrão ($1,00 \text{ mg L}^{-1}$) e após MEPS com fase extratora C8.

Os sorventes C18 e C8 forneceram respostas cromatográficas elevadas para ambos os agrotóxicos. Para C8 o método forneceu FC de 13,8 para iprodione e 15,5 para tebuconazole. A repetitividade dos ensaios ($n=3$) foi boa (DPR entre 2,0 e 7,2%). A **figura 1b** mostra a melhora significativa na intensidade das bandas dos agrotóxicos após o procedimento MEPS. O método proposto foi capaz de determinar os agrotóxicos de modo simples, rápido e utilizando pequenas quantidades de amostra e solventes.

Agradecimentos

CNPq, Unidade Acadêmica Especial de Química, UFG-Regional Catalão

Referências

1. Yang, L., Said, R., Abdel-Rehim, M., Journal of Chromatography B, 2017, 1043, 33.

Determinação do perfil químico de frutos de pequi (*Caryocar brasiliense* Camb.) por *Desorption Electrospray Ionization Mass Spectrometry Imaging* (DESI-MSI)

Ruver R. F. Ramalho¹ (PG), Lanaia I. L. Maciel¹ (PG), Giovanna L. Araújo (PG)¹, Igor Pereira¹ (PQ), Rosineide C. Simas¹ (PQ), Boniek G. Vaz¹ (PQ). *giolopesara@gmail.com*.

¹Instituto de Química da Universidade Federal de Goiás.

Palavras-chave: imageamento químico, DESI-MS, pequi.

Os frutos do gênero *Caryocar brasiliense*, conhecidos popularmente como pequi, possuem tamanhos variados de coloração amarela. O nome é derivado de palavras indígenas (*py*: pele, *qui*: espinhos) que significam "pele com espinhos". O sabor característico confere ao fruto alto consumo no período de frutificação, sendo importante na economia local. A polpa e a amêndoa são ricas em lipídeos, carotenoides, compostos fenólicos, entre outros. O óleo extraído da polpa e da amêndoa está associado a benefícios terapêuticos como atividades antioxidantes, anti-inflamatórias, anticarcinogênicas e efeitos antimicrobianos.¹ Neste trabalho, foi realizado o imageamento químico dos frutos de pequi utilizando a técnica *Desorption Electrospray Ionization Mass Spectrometry* (DESI-MS).² Em DESI-MS, um spray com gotículas carregadas é direcionado à uma superfície, permitindo que os compostos químicos da superfície sejam ionizados, extraídos e dessorvidos para serem subsequentemente analisados por MS. Ao direcionar o spray em várias partes da superfície da amostra, é possível determinar a distribuição espacial de inúmeras espécies moleculares através de um imageamento químico. Para a realização dos experimentos, os frutos do pequi foram adquiridos em feiras na cidade de Goiânia-GO, cortados ao meio com uma faca e realizado a impressão dos constituintes químicos em diferentes superfícies utilizando uma prensa manual. Papel filtro, papel manteiga, membrana de celulose e membrana de teflon (PFTE) foram avaliados, e o papel manteiga demonstrou maior eficiência na extração e dessorção dos íons. Os solventes metanol, acetonitrila, e as misturas de solventes metanol:acetonitrila (1:1) e acetonitrila:água (1:1) também foram avaliados, e a maior abundância iônica foi adquirida utilizando metanol:acetonitrila (1:1). Os experimentos foram realizados utilizando uma fonte de ionização DESI construída no laboratório e acoplada a um espectrômetro de massas LCQ Fleet (Thermo Scientific, USA) no modo de ionização negativo. Os íons monitorados para construção das imagens foram os m/z 187 $[M-H]^-$ e m/z 835 $[M-H]^-$, que apresentaram uma distribuição oposta nos frutos do pequi. Enquanto o íon m/z 835 foi detectado apenas no mesocarpo interno (coloração amarela) e na amêndoa (coloração branca), o íon m/z 187 foi detectado na região do endocarpo. Os íons monitorados neste experimento serão identificados através de Espectrometria de Massas de Alta Resolução. Dessa forma, o imageamento químico dos constituintes do fruto do pequi mostraram que existem diferenças na composição de cada parte do fruto. Este estudo mostra-se promissor na compreensão da distribuição química de analitos do fruto que será utilizado para caracterizar e compreender a composição de frutos de pequi de diferentes variedades.

Agradecimentos

À CAPES, à SEDUC-Goiás e ao LaCEM.

Referências

1. Torres, L. R. O., Santana, F.C., Shinagawa F. B., Mancini-Filho, J., *Grasas Aceites*, 2018, 69(2), 1.
2. Takáts, Z., Wiseman, J.M., Gologan, B., Cooks, R.G. *Science*, 2004, 306(5695), 471.

Título: Dispositivos vestíveis, uma nova ferramenta de baixo custo para diagnósticos clínicos de diabetes mellitus e periodontites

Nome(s) do(s) autor(es): Lucas F. de Castro¹ (IC), Soraia V. de Freitas¹ (PG), Lucas da C. Duarte¹ (PG), João A. C. de Souza² (PQ), Thiago R. L. C. Paixão³ (PQ), Wendell K. T. Coltro¹

lucas_decastro2015@hotmail.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Campus Samambaia, Goiânia, GO 74690-900, Brazil, ²Faculdade de Odontologia, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, GO 74605-220, Brazil, ³Instituto de Química, Universidade de São Paulo, São Paulo, SP 05508-000, Brazil.

Palavras-chave: Diagnósticos Clínicos, Dispositivos vestíveis, Microfluídica em papel.

Os dispositivos microfluídicos baseados em papel (μ PADs) e os dispositivos vestíveis foram altamente estudados para serem usados como ferramentas de diagnóstico devido a suas vantagens, como simplicidade e capacidade de fornecer resultados rápidos sem instrumentos¹. Doenças como periodontite e o diabetes mellitus pode ser potencialmente detectado através desses dispositivos pela detecção de importantes biomarcadores². Este estudo descreve o desenvolvimento de μ PADs por meio de cortador artesanal para diagnósticos salivares de glicose e nitrito. Além disso, também é apresentado o uso de μ PADs integrados a um protetor bucal como sensor vestível para o monitoramento da glicose. Os μ PADs foram projetados para conter duas zonas de detecção para ensaios de glicose e nitrito e uma zona de amostragem interconectada por canais microfluídicos. Inicialmente, o desempenho analítico dos μ PADs propostos foi investigado e forneceu comportamento lineares ($r^2 \geq 0,994$) na concentração varia de 0 a 2,0 mmol L⁻¹ e 0 a 400 μ mol L⁻¹ para glicose e nitrito, respectivamente. Sob condições otimizadas, os limites de detecção alcançados para glicose e nitrito foram 27 μ mol L⁻¹ e 7 μ mol L⁻¹ respectivamente. Amostras de saliva humana foram coletadas de indivíduos saudáveis e pacientes previamente diagnosticados com periodontite ou diabetes e analisadas nos μ PADs propostos. Os resultados encontrados usando μ PADs revelaram valores mais altos de concentração de glicose na saliva coletados de pacientes diagnosticados com diabetes mellitus e maior nitrito concentrações na saliva coletadas de pacientes diagnosticados com periodontite, conforme o esperado. Os resultados obtidos em μ PADs não diferiram estatisticamente daqueles medidos por espectrofotometria. Com o objetivo de desenvolver dispositivos vestíveis baseados em papel sensores, os μ PADs foram integrados, pela primeira vez, a um protetor bucal de silicone usando um suporte impresso em 3D. A prova de conceito foi demonstrada com sucesso através do monitoramento da concentração de glicose na saliva após a ingestão de chocolate. De acordo com os resultados aqui relatados, os dispositivos microfluidicos em papel oferecem grande potencial para diagnósticos, possibilitando sua integração em um protetor bucal de silicone, gerando simples, de baixo custo, sem instrumentos, e poderosos sensores vestíveis.

Referências

1. Klasner SA, Price AK, Hoeman KW, Wilson RS, Bell KJ, Culbertson CT. Paper-based microfluidic devices for analysis of clinically relevant analytes present in urine and saliva. *Anal Bioanal Chem.* 2010;397:1821–9.
2. Choi S, Kim SK, Lee GJ, Park HK. Paper-based 3D microfluidic device for multiple bioassays. *Sensors Actuators B Chem.* 2015;219:245–50

Emprego de cascas de mandioca (*Manihot esculenta*) como biossorvente para remoção de Diuron® em matrizes aquosas

Isabela R. Batista¹ (IC)*, Carlos F. Silva¹ (IC), Fabiana A. Marques¹ (PQ)
*reisisabela31@gmail.com

¹Departamento de Química, IF Goiano – Campus Ceres.

Palavras-chave: Biossorção, UV-Vis, Mandioca.

O crescimento agropecuário e industrial é um grande avanço para a sociedade, gerando empregos e consequentemente aumentando a qualidade de vida, porém esse crescimento é responsável pela contaminação de solos e águas decorrente dos defensivos agrícolas utilizados no ambiente em grande escala para controle de pragas (herbicida, inseticida e fungicidas). Dessa forma surge a necessidade de encontrar métodos fáceis e de baixo custo para reduzir ou eliminar a presença de contaminantes em recursos híbridos¹. A adsorção é um método bem conhecido e comumente aplicado para remoção de contaminantes, devido sua ampla aplicabilidade, praticidade e baixo custo, é um método que consiste em um determinado material sólido concentrar em sua superfície de porosidade alta substâncias presentes em meio aquoso através de transferência para a remoção. Diante disso, o trabalho tem como objetivo estudar a capacidade das cascas de mandioca, na qual normalmente são jogadas no lixo, como potencial material biossorvente. O material recolhido foi seco em estufa de circulação forçada a 60°C durante 24 horas constando ao fim que 40% era composto de água. O material foi triturado e peneirado com o objetivo de obter partículas de 500 µm. Para o tratamento em H₂SO₄ 0,1 mol.L⁻¹ e NaOH, foi utilizado aproximadamente 10 g do material peneirado sobre aquecimento de 65°C durante 6 horas. Realizando ensaios em triplicata, utilizando 20 mg dos adsorventes e 10 ml de Diuron® em concentração 8 mg. L⁻¹, posteriormente sendo analisado no UV-Vis com comprimento de onda 248 nm, foi observado que o material alcalinizado possui uma melhor adsorção do herbicida (0,31 mg.g⁻¹). Os ensaios de pHpcz utilizou 20 ml de NaCl 0,1 mol.L⁻¹, ajustando o pH de 1 a 12, posteriormente 20 mg do material básico em contato com cada pH durante 24 horas. O pHpcz resultou em 6,41. Analisou o efeito do pH utilizando Diuron® em concentração 8 mg. L⁻¹ e 20 mg do material básico, ajustando pH em 1; 3; 6,4; 8 e 12. A análise do efeito do pH consta o pH 12 com maior capacidade de remoção, sendo ele de 0,21 mg.g⁻¹ correspondendo a 64,9%, e isso ocorre devido ao pKa do Diuron® ser 13,55, e assim libera prótons no pH mais básico. O trabalho está em andamento, e demais avaliações físico-químicas para entendimento do processo estão sendo realizadas.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus por sempre estar ao meu lado, minha orientadora por disponibilizar seu tempo para ajudar e ao Instituto Federal Goiano – Campus Ceres por oferecer sua infraestrutura para a realizações dos experimentos.

Referências

1. Viottia, P. V.; Moreira, W. M.; Dos Santos, O. A. A.; Bergamasco, R.; Vieira, A. M. S.; Vieira, M. F. Journal of Cleaner Production, 2019, V. 219, 809.

Especiação de Cr(III) por extração em fase sólida utilizando *Luffa cylindrica* magneticamente impregnada

Deborah C. Bagano Gonçalves¹ (IC), Jordana de A. N. Oliveira¹ (PG), Vanessa N. Alves¹ (PQ). *deborahbagano21@hotmail.com*

¹Universidade Federal de Goiás – Regional Catalão, Catalão – GO, Brasil, CEP - 75704-020

Palavras-chave: extração, especiação, adsorvente natural, impregnada magneticamente.

A extração em fase sólida (SPE) é uma das técnicas mais usadas em química analítica com a finalidade de extrair e/ou pré-concentrar substâncias, dentre elas íons metálicos¹. Sendo possível utilizar adsorventes naturais com vantagens tais como o baixo custo e alta capacidade adsorptiva devido aos grupos funcionais presentes em suas estruturas. Além disso, é possível a modificação superficial desses materiais, e a derivatização magnética é uma delas, conferindo a eles magnetismo, o que facilita o processo de separação/filtração. Assim, esse trabalho propõe a extração e especiação de Cr(III) em amostras aquosas utilizando a *Luffa cylindrica* magneticamente impregnada como adsorvente. Inicialmente, foi realizada a impregnação da *Luffa* utilizando fluído ferromagnético, previamente sintetizado². O material obtido foi caracterizado por Espectroscopia no infravermelho (IV), Energia de Fluorescência de Raios X (EDX) e análise do ponto de carga zero (PCZ). O IV apresentou o surgimento de uma pequena banda em 480 cm⁻¹ característica da ligação Fe-O, após a impregnação magnética. Com a análise por EDX observa-se que há 17,52% de ferro no material *in natura*, não tendo sido detectado a presença de cromo, entretanto a análise após magnetização apontou um aumento nas porcentagens de ferro, comprovando a impregnação do material. Após o processo de adsorção, a presença de cromo em torno 0,38%, demonstra a adsorção deste íon. A análise do PCZ, aponta que o adsorvente possui carga superficial nula em pH 4,8. Assim, a capacidade adsorptiva desse material, frente às espécies de cromo (III e VI) foi avaliada. Em pH 5 é possível verificar máxima adsorção de Cr(III) e a mínima de Cr(VI), sendo possível a separação das espécies com o controle de pH. A extração foi realizada com agitação por vórtex e a separação das fases realizada com o auxílio de um imã. Os parâmetros de extração foram otimizados e os valores para o Cr(III) foram, massa de adsorvente: 25 mg, tempo de adsorção: 10 min, eluente: HCl 0,1 mol L⁻¹ e tempo de dessorção: 1 min. Assim foi obtida uma frequência analítica de 5,45 amostras/hora e um fator de pré-concentração igual a 25. A avaliação da cinética de adsorção foi realizada, sendo que o processo apresentou melhor ajuste ao modelo de Avrami, caracterizado por uma cinética de adsorção rápida. O desempenho analítico do método foi avaliado, sendo sensibilidade de 10⁻⁴, faixa linear de trabalho 25,0 – 2000 µg L⁻¹, limite de detecção e quantificação de 7,53 e 25,1 µg L⁻¹, respectivamente. A precisão obtida foi de 1,16%. Desse modo, o material utilizado neste trabalho possui um grande potencial adsorptivo frente à extração seletiva de Cr(III), com uma rápida cinética e limites de detecção e quantificação favoráveis para metodologias de extração.

Agradecimentos

UFG-RC, IQ-UFU, FAPEG, CAPES e CNPq.

Referências

1. Silva, C.A.S., Silva, R.L.S., Figueiredo, A.T., Alves, V.N.; J. Braz. Chem. Soc., v. 00, n. 00, 1-7, 2019.
2. Marinovich M., Boraso M.S., Testai E., Galli C.L., Regulatory Toxicology and Pharmacology, 69, 2014, 416.

Espectrometria de massas por *probe electrospray ionization* revestido com filme de polipirrol para detecção seletiva de compostos nitrogenados em frações de petróleo

Lidya C. Silva¹ (PG), Taynara R. Covas¹ (PG), Ricardo A. Bernardo¹ (PG), Andréa R. Chaves¹ (PQ), Felipe P. Fleming² (PQ), Boniek G. Vaz¹ (PQ)
lidya_cardozo@discente.ufg.br

¹Laboratório de Cromatografia e Espectrometria de Massas, Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, 74001-970, Goiânia-GO, Brasil.

²Petróleo Brasileiro S.A, CENPES, 21941-915, Rio de Janeiro-RJ, Brasil.

Palavras-chave: espectrometria de massas ambiente, *probe electrospray ionization*, petroleômica.

Em espectrometria de massas, os métodos de ionização ambiente representam a alternativa mais simples e eficaz para geração e transferência de íons para o sistema de alto vácuo do espectrômetro de massas.¹ *Probe Electrospray Ionization* (PESI) é uma técnica de ionização ambiente derivada da ionização por *Electrospray* (ESI) que utiliza uma agulha sem o capilar onde uma alta voltagem é aplicada para a geração de íons.² Esta fonte de íons permite análises rápidas com mínimo preparo de amostras, além disso pode ser facilmente montada em laboratório.³ No entanto, em petroleômica técnicas de separação são requeridas devido à grande complexidade das amostras. Nos últimos anos, técnicas que integram etapas de extração e ionização em um único dispositivo têm sido exploradas para a análise de amostras complexas. Neste sentido, o uso do polipirrol como fase extratora para análise de compostos nitrogenados em matrizes complexas é reportado na literatura.⁴ Neste trabalho, o uso do PESI recoberto com polipirrol (PESI-PPy) para aplicações em petroleômica é investigado com o objetivo de melhorar a sensibilidade das análises PESI-MS. O método desenvolvido, PESI-PPy, possibilitou a análise direta de compostos da classe N em frações de maltenos. Além disso, o uso de diferentes solventes permitiu o acesso a diferentes faixas de DBE e distribuições de carbonos em uma mesma amostra. Portanto, o método proposto apresenta alto potencial para análise seletiva de compostos nitrogenados em amostras de maltenos.

Agradecimentos

Petrobras, CAPES, CNPq e FAPEG.

Referências

1. Silva, L.C., Pereira, I., Carvalho, T.C., Filho, J.F.A., Romão, W., Vaz, B.G., *Analytical Methods*, 2019, 11, 999.
2. Hiaroka, K., Nishidate, K., Mori, K., Asakawa, D., Suzuki, S., *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, 2007, 21, 3139.
3. Silva, L.C., Carvalho, T.C., Pereira, I., Marana, J.C., Laviola, B.G., Abdelnur, P.V., Vaz, B.G., *Journal for the American Society for Mass Spectrometry*, 2019, 10, 2051.
4. Bernardo, R.A., Silva, L.C., Queiroz, M.E.C., Vaz, B.G., Chaves, A.R., *Journal of Chromatography A*, 2019, 1603, 23.

Estudo da capacidade de adsorção da biomassa de abóbora *in natura* e tratada para remoção do herbicida Diuron® em matrizes aquosas

Carlos F. da Silva¹ (IC)*, Isabela R. Batista¹ (IC), Fabiana A. Marques¹ (PQ)
*carsilva03@gmail.com.

¹Departamento de Química, IF Goiano – Campus Ceres

Palavras-chave: Biossorção, Biossorvente, UV-Vis.

O crescente uso de agroquímicos representa um grande problema, visto que causa sérios danos ao meio ambiente e aos seres vivos em geral. Por esse motivo, são estudadas novas rotas eficientes e que sejam de baixo custo e fácil aplicação para remoção desses contaminantes em meios aquáticos, por exemplo¹. A adsorção é um dos métodos mais utilizados na remoção de substâncias em meio aquoso, apresentando algumas vantagens se comparada com outros métodos, como baixo requerimento de energia para ocorrer, fácil aplicação e alta eficiência. A utilização de adsorventes sintéticos apresenta problemas como alto custo de aplicação em larga escala e dificuldade de regeneração do material. Na tentativa de substituir os adsorventes convencionais, surgem os biossorventes. As cascas de abóbora (*Cucurbita spp.*) são resíduos que não apresentam valor comercial e podem ser utilizadas em suplementação alimentar. O trabalho tem por objetivo estudar a capacidade das cascas de abóbora como um possível biossorvente. O material obtido foi seco em estufa com renovação e circulação forçada de ar a 65 °C por 24 horas. A secagem mostrou que 82,27% da massa do material era composta principalmente por água. O material foi triturado e peneirado para obtenção de partículas de 500 µm. O tratamento foi feito utilizando-se 10 g do material e soluções de hidróxido de sódio (NaOH) e ácido sulfúrico (H₂SO₄) 0,1 mol.L⁻¹ à 65 °C por 6 horas. Os adsorventes *in natura* e tratado com solução ácida foram caracterizados por espectroscopia na região do infravermelho médio com transformada de Fourier (*mid* – FTIR), que mostrou que o tratamento não causou mudanças significativas na estrutura química do material. Ensaio realizado em triplicata com 10 mL de solução de Diuron® 8mg.L⁻¹, 20 mg de adsorvente e monitoramento por espectroscopia UV-Vis (248 nm), mostraram que o material tratado com solução ácida apresenta os maiores valores de capacidade de adsorção (0,63 mg.g⁻¹). O pH_{pcz} foi determinado para verificar quais as faixas de pH em que o material apresenta maior eficiência na remoção de substâncias catiônicas e aniônicas. O ensaio para a determinação do pH_{pcz} foi feito com 20 mL de solução de cloreto de sódio 0,1 mol.L⁻¹, com pH ajustado de 1 a 12 com soluções de NaOH e HCl 0,1 mol.L⁻¹ e 20 mg do material, com tempo de contato de 24 h. O pH_{pcz} para o adsorvente tratado com solução ácida foi 3,85. O efeito do pH foi avaliado utilizando-se 10 mL de solução do agroquímico a 8 mg.L⁻¹ com pH ajustado em 1; 2; 3,5; 8 e 12, 20 mg do material tratado com solução ácida. Os maiores valores de capacidade de remoção e de percentual de remoção foram em pH 12, sendo eles, respectivamente, 0,626 mg.g⁻¹ e 16,47%. Mais estudos serão realizados para determinação da ação do material frente a diferentes parâmetros físico-químicos.

Agradecimentos

Instituto Federal Goiano – Campus Ceres pela estrutura que possibilitou o desenvolvimento do trabalho.

Referências

1. GONÇALVES, A. C. Jr. Revista IBICT, 2013, V. 06, 105.

Estudo quimiométrico do perfil químico de tomates de mesa por *paper spray ionization mass spectrometry* (PSI-MS)

Ayrton M. S. Santos¹ (PG); Raquel C. Faria¹ (PG); Jean C. P. Sousa¹ (IC)* Igor Pereira¹ (PQ); Abadia R. Nascimento¹ (PQ); Boniek G. Vaz¹ (PQ). *jeanpsousa01@gmail.com.

¹Universidade Federal de Goiás, Campus Samambaia.

Palavras-chave: espectrometria de massas, *paper spray*, tomate, quimiometria, sPLS-DA.

O tomate (*Solanum lycopersicum* L.) é uma das culturas mais difundidas no mundo. O estado de Goiás é o maior produtor do Brasil, correspondendo a 1,29 milhões de toneladas em 2019.¹ Existem diversas formas de tomates produzidos e consumidos. No presente trabalho, foram compradas 36 sementes de diferentes híbridos no comércio de Goiânia, que são subdivididas em cinco grupos: salada, saladete, minitomate, caqui e santa cruz.² Todas as amostras foram plantadas no Setor de Horticultura da Escola de Agronomia da UFG. Foram obtidas três unidades de cada híbrido para o preparo de amostra, onde a casca foi retirada, macerada e o solvente acetonitrila grau HPLC foi adicionado para a extração de compostos polares. A solução sobrenadante foi analisada por espectrometria de massas utilizando a técnica de ionização *paper spray ionization* (PSI-MS),³ no modo negativo. A partir dos espectros de massas obtidos, os sinais de massa/carga (m/z) e intensidade dos íons foram processados no software *MetaboAnalyst*.⁴ Os dados foram normalizados pela mediana e escalonados por Pareto. Considerando a análise discriminante de mínimos quadrados parciais esparsos (sPLS-DA), foi possível realizar a separação dos tomates em quatro grandes grupos com 45,7% dos dados explicados em duas PCs (Fig. 1). Assim, o *loadings* confirmam que os íons m/z 117, 128, 133, 173, 179, 191, 215, 279 e 308 contribuem para o agrupamento dos grupos salada e santa cruz, e íons m/z 458, 446, 458 e 446 para o agrupamento dos grupos caqui, minitomate e saladete.

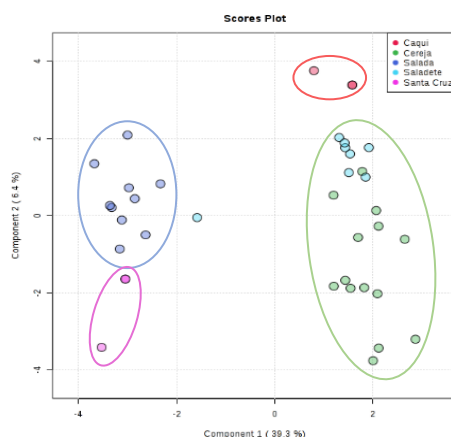


Figura 1: Scores plot por sPLS-DA

Agradecimentos

À CAPES pelo aporte financeiro.

Referências

1. IBGE. IBGE/Sistema de contas nacionais. Disponível em: <https://sidra.ibge.gov.br/home/lspa/brasil>. Acesso em janeiro de 2020.
2. ALVARENGA, M. A. R. Tomate: produção em campo, em casa de vegetação e em hidroponia. Lavras: UFLA, 2004. 400.
3. Liu, J., Wang, H., Manicke, N. E., Lin, J.-M., Cooks, R. G., Ouyang, Z., Analytical Chemistry. 2010. 82, 2463.
4. Chong, J., Wishart, D.S., Xia, J., Current Protocols in Bioinformatics, 2019, 68, 128.

Estudos Eletroquímicos para a determinação de vitamina B12 em dispositivos descartáveis

Ana C. A. Ananias¹ (IC), Kamylla P. Venancio¹ (PG), Livia F. Sgobbi¹ (PQ). *E-mail:* ana_ananias@discente.ufg.br

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Avenida Esperança, s/n – CEP: 74690-900, Goiânia - GO - Brasil

Palavras-chave: Vitamina B12, sensor eletroquímico, eletrodo impresso, voltametria cíclica.

A vitamina B12 (cobalamina) é solúvel em água, e desempenha um papel essencial no organismo, auxiliando em várias funções, como a produção de glóbulos vermelhos e brancos, função normal de células nervosas e a replicação de DNA e RNA.^[1] O monitoramento dos níveis de vitamina B12 é muito importante, pois sua deficiência pode causar graves danos, muitas vezes irreversíveis, no sistema nervoso e no cérebro.^[1,2] A principal causa da deficiência de vitamina B12 é o consumo de dietas vegetarianas rigorosas, além de pessoas idosas; os sinais incluem anemia megaloblástica e sintomas neurológicos.^[3] Atualmente, os métodos já existentes para a determinação da vitamina B12 apresentam tempo de análise longo e custo elevado.^{1,2} Diante da problemática apresentada pelos métodos disponíveis, o presente trabalho propõe o desenvolvimento de um sensor eletroquímico descartável de baixo custo, que utilize alguns microlitros de amostra e forneça resposta rápida. A primeira etapa consistiu na fabricação de eletrodos impressos de carbono, contendo os eletrodos de trabalho, auxiliar e de referência. Realizou-se a otimização da proporção de tinta de carbono comercial e dos solventes para sua diluição (etanol, acetona, acetonitrila, dimetilsulfóxido, dimetilformamida) para a impressão por serigrafia dos eletrodos. Após obter o dispositivo com melhor desempenho eletroquímico, foram avaliados diferentes tipos de eletrólitos (cloreto de potássio, perclorato de sódio e perclorato de lítio) combinando-os com meio aquoso e alcoólico e tampões fosfato de pH 3 e 9. Tendo estes meios propostos, investigou-se o comportamento eletroquímico da vitamina B12 por técnicas voltamétricas. Obteve-se um melhor resultado para a voltametria de onda quadrada, onde foi possível observar um pico em -1,07 V referente à vitamina B12 com concentração de $0,01 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ em solução aquosa com perclorato de sódio 0,1 M, indicando a oxidação do Co (I) para o Co (II). Os resultados obtidos até o presente momento são preliminares. Novos parâmetros estão sendo testados a fim de otimizar a performance do dispositivo, como o pH, e a modificação da superfície do eletrodo com nanomateriais para uma maior eficiência de detecção e posterior aplicação.

Agradecimentos

CAPES

Referências

1. Michopoulos, A., Florou A.B., and Prodromidis M.I., *Electroanalysis*, 2015, 27, 1876.
2. Parvina M.H., Azizia E., Arjomandia J., Leeb J.Y., *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2018, 261, 335.
3. Combs Jr, G.F., McClung, J.P. *The Vitamin: Fundamental aspects in nutrition and health* (Fifth Ed.), Academic Press, 2017, p. 628.

Extração por eletromembrana em um sistema trifásico com conformação “U” para matrizes aquosas

Giovanna L. Araújo¹ (PG), Rafael O. Martins (PG), Rosineide C. Simas (PQ), Andrea R. Chaves¹ (PQ), Boniek G. Vaz¹ (PQ). *giolopesara@gmail.com*

¹Universidade Federal de Goiás

Palavras-chave: Técnica miniaturizada, EME, Hollow Fiber

Anteriormente a análise de uma amostra, sobretudo as de grande complexidade, é de extrema importância que sejam realizadas etapas de preparo de amostra¹. Métodos convencionais como extração líquido-líquido e a extração em fase sólida, são muito empregados, demonstrando uma elevada eficiência². Porém, essas técnicas demonstram desvantagens como, o elevado consumo de solvente e amostra e etapas laboriosas. Assim, técnicas que contrariam essas desvantagens, como as técnicas miniaturizadas de preparo de amostra³ são de grande interesse. Uma dessas técnicas de destaque é a Extração por Eletromembrana (EME)⁴, que utiliza a aplicação de uma tensão através de dois eletrodos metálicos, gerando polos que provocam a migração eletrocinética dos íons para o polo de carga oposta localizado dentro de uma membrana, realizando a preconcentração do analito, o *clean-up* da amostra. Várias configurações podem ser utilizadas para esse dispositivo de extração. O método clássico utiliza uma membrana *Hollow Fiber* com dois eletrodos, um interior e outro exterior a membrana. Porém outras configuração podem aumentar a eficiência de extração do método⁵. O presente trabalho demonstra a construção de uma configuração em “U” para a técnica de EME em um sistema trifásico⁶. São utilizados três eletrodos de platina, dois retilíneos e um em formato espiral, e adicionada a membrana polimérica com o solvente orgânico suportado, em forma de “U” nos eletrodos retilíneos. O sistema é mantido sobre agitação. Para atestar que a extração na nova configuração ocorre, espécies ácidas em meio aquoso foram utilizadas como amostra. Dessa forma, o polo positivo é gerado, no interior da membrana, aplicando 100 V, de modo a atrair as espécies ácidas, para o interior da membrana. Essa solução aceptora é retirada após 40 min e analisada no Espectrômetro de Massas. Nos espectros obtidos foram observados *m/z* característicos dessas espécies, demonstrando que a célula construída foi capaz de promover a extração dessas espécies. A célula para EME possui ampla aplicação, sendo que a conformação em “U” possui capacidade para promover extrações mais efetivas que no método convencional, por aumentar a área de contato, e o volume da solução interior.

Agradecimentos

Agradeço aos órgãos de fomento, CAPES, CNPq e PETROBRAS

Referências

1. Hidayah N. N., Abidin S. Z. *Minerals Engineering*, 2017, 112, 103
2. Luiz, A. L., Maciel, E. V. S., & Lanças, F. M., *Scientia Chromatographica*, 2015, 7, 157.
3. Ocaña-González, J. A., Fernández-Torres, R., Bello-López, M. Á. & Ramos-Payán, M. A review *Analytica Chimica Acta*, 2016, 905, 8.
4. Anderson, R. O. *Fundamentals of the Petroleum Industry*. Oklahoma University, 1987.
5. Huang, C., Chen, Z., Gjelstad, A., Pedersen-Bjergaard, S. & Shen, X. *TrAC - Trends in Analytical Chemistry*, 2017, 95, 47.
6. Drouin, N., Kubáň, P., Rudaz, S., Pedersen-Bjergaard, S. Schappler, J. *TrAC*, 2019, 113, 357.

Implementação da microfluídica digital para a automatização de ensaios analíticos

Danielly S. Rocha¹ (PG) e Wendell K. T. Coltro^{1,2} (PQ)
 daniellysr@outlook.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, 74690-900, Goiânia, GO, Brasil

²Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Bioanalítica, 13084-971, Campinas, SP, Brasil

Palavras-chave: microfluídica digital, gotas, automatização e ensaios analíticos.

A microfluídica digital (*digital microfluidics*, DMF), é uma tecnologia relativamente nova que se baseia na manipulação de gotas na ordem de nano a microlitro sobre uma plataforma *lab-on-a-chip* composta por um arranjo de eletrodos.¹ Por meio dessa técnica, pode-se promover a mistura, a junção, a separação de gotas, a inserção de amostra nos reservatórios, bem como movimentá-las sobre a plataforma através da aplicação de potencial usando protocolos que podem ser tanto em tempo real quanto programado. A DMF vem sendo empregada principalmente na Ásia, Europa e América do Norte com aplicações que incluem desde reações químicas e enzimáticas à diagnósticos clínicos.² Entretanto, essa tecnologia ainda não foi explorada no Brasil. Nessa perspectiva, o objetivo deste trabalho é introduzir as operações básicas da DMF e promover a automatização de ensaios analíticos e como prova de conceito a detecção colorimétrica de nitrito utilizando a reação adaptada de Griess.³ Para isso, foi utilizado *chips* comerciais, *Drop-Bot* modelo DB3-120 e *Webcam Logitech* (Figura 1A-C), equipado com o *software MicroDrop* e as imagens capturadas tratadas com o *software Corel PHOTO-PAINT*. Para a detecção de nitrito, parâmetros operacionais como potencial elétrico, tempo de aplicação do potencial e frequência estão sendo otimizados. Além disso, tem-se estudado a adição de alguns surfactantes ao meio reacional a fim de promover viscosidade e tensão superficial ideais para o ensaio colorimétrico sobre a plataforma de DMF.

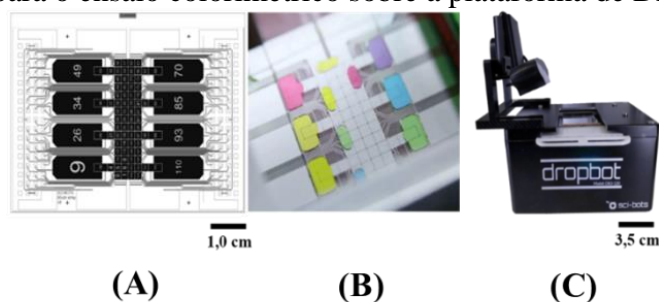


Figura 1. (A) *Layout* chip com 120 eletrodos. (B) Manipulação de gotas no chip cromado. (C) Instrumentação da DMF.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, INCTBio e FAPEG.

Referências

1. Fobel, R., Kirby, A. E., Ng, A. H. C., Farnood, R. R. and Wheeler, A. R., *Advanced Materials*, 2014, 26, 288.
2. Choi, K., Ng, A. H. C., Fobel, R. and Wheeler, A. R. *Annual review of Analytical Chemistry*, 2012, 5, 413.
3. Castro, L. F., Freitas, S. V., Duarte, L. C., Souza, J. A. C., Paixão, T. R. L. C., Coltro, W. K. T., *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2019, 411, 4919.

Método de detecção por distância aplicada na volumetria de neutralização em dispositivos microfluídico fabricados em papel

Lorrayne G. A. Dias (IC)^{1,2*}, Lucas C. Duarte (PG)¹, Wendell K. T. Coltro (PQ)^{1,2}. e-mail: lorrayne.gabi@gmail.com

¹ Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, CEP 74690-900, Goiânia, GO

Palavras-chave: Dispositivos microfluídicos baseados em papel, titulação, detecção por distância, análise volumétrica.

Os dispositivos microfluídicos baseados em papel vem recebendo grande atenção em química analítica por apresentar vantagens como facilidade de fabricação, acessibilidade, simplicidade operacional comumente utilizadas para aplicações em *point-of-care*¹. No entanto, tradicionalmente a maioria dos PADs utilizam algum tipo de instrumentação para detecção quantitativa, como câmeras digitais ou scanners. A detecção baseada em distância possibilita a detecção quantitativa com desempenho analítico semelhante as abordagens clássicas sem necessidade de instrumentos externos². Neste sentido, o presente trabalho descreve uma metodologia simples que utiliza a distância do desenvolvimento de cor como modo de detecção do produto de uma titulação ácido-base. Os PADs foram desenhados contendo um canal de 3 × 40 mm e uma zona circular de 5 mm de diâmetro utilizando um *software* gráfico (*Corel Draw*), em seguida os dispositivos são impressos a cera para delimitação da barreira do canal, posteriormente aquecidos e selados com uma lâmina de poliéster.

A titulação de neutralização em substrato de papel foi realizada usando ácido clorídrico como titulante e hidróxido de sódio, na presença do indicador fenolftaleína. Inicialmente o canal foi preenchido com NaOH e a solução indicadora formando uma coloração rosa dentro do canal. Em seguida, o ácido clorídrico foi adicionado na zona circular em diferentes concentrações (0 a 0,5 mol/L), o qual percorre o canal rosa tornando-o incolor até atingir seu ponto de equivalência. A distância foi medida com auxílio de um paquímetro digital. Todas as análises foram feitas em replicatas com n=5. A Figura 1 apresenta a correlação entre a distância do desenvolvimento de cor com a variação da concentração de ácido clorídrico. A curva analítica foi realizada variando a concentração do ácido clorídrico de 0 a 0,5 mol/L, a qual promoveram o deslocamento do plug colorido de 24,68 a 28,62 mm obtendo uma correlação linear com R²=0,98. Estes resultados demonstram a elevada potencialidade da metodologia proposta para aplicações em química analítica, relacionado as técnicas de titulação.

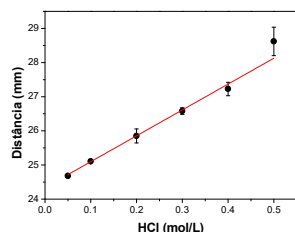


Figura 1. Curva de titulação obtida via detecção por distância em dispositivos microfluídicos.

A metodologia de detecção baseada na distância demonstrou enorme potencialidade para aplicações analíticas envolvendo métodos volumétricos. Baseando-se nos resultados preliminares, o método pode ser expandido para aplicações envolvendo reações de precipitação, complexação e óxido-redução.

Agradecimentos

INCTBio, CNPq e CAPES.

Referências

¹Martinez, A.W., Phillips, S.T., Whitesides, G.M., Carrilho, E., *Anal. Chem.* 2009, **82**, 3-10.

²Cate, D.M, Dungchai, Cunningham, J.C., Volckens J, Henry, C.S, *Lab Chip.* 2013, **13**, 2397

Metodologia de adsorção em barra utilizando SrTiO₃ como adsorvente para extração de íons Cd²⁺

Amanda S. Monteiro¹ (IC)*, Vanessa N. Alves¹ (PQ)
santosmonteiro.amanda@gmail.com

¹ Universidade Federal de Catalão, Unidade Acadêmica Especial de Química Catalão/GO, Brasil, CEP – 75704-020

Palavras-chave: cádmio, extração, adsorção, SPE.

Os íons metálicos geralmente são encontrados na natureza na sua forma dissociada, em baixas concentrações nos mais diversos tipos de matrizes.¹ Em virtude de suas baixas concentrações, faz-se necessária a utilização de etapas de extração e/ou pré-concentração para sua determinação. A extração em fase sólida (SPE) e suas variações são as técnicas de extração mais comumente utilizadas por apresentar diversas vantagens. Nesse contexto, a técnica de adsorção em barra mostra grande eficiência na adsorção de íons metálicos. Trata-se uma barra recoberta com material sólido adsorvente, disposto em uma solução contendo o analito de interesse.² Existem diversos materiais que podem ser utilizados nas técnicas SPE, dentre eles destacam-se os óxidos que possuem características físicas e químicas específicas além de alta reatividade. Assim, uma metodologia de adsorção em barra foi desenvolvida, para extração de íons Cd²⁺ em amostras aquosas utilizando SrTiO₃ como adsorvente. Inicialmente o pH foi avaliado, utilizando soluções contendo o íon Cd²⁺ na concentração de 1 mg L⁻¹ e variando-se o pH do meio de 5 a 11, 5 mL destas soluções foram colocadas em contato com as barras recobertas, em agitador magnético durante 5 minutos, posteriormente a barra recoberta foi retirada e o sobrenadante levado para análise por espectroscopia de absorção atômica por chama (FAAS). Observa-se que em valores de pH acima de 5, o material apresenta aproximadamente 100% de adsorção. Para que maiores porcentagens de adsorção sejam obtidas é importante trabalhar com um valor de pH onde se tenha o íon metálico preferencialmente com carga oposta à carga superficial do material adsorvente, assim o pH 9 foi fixado para os demais ensaios, garantindo melhores condições de adsorção, bem como aumentando a seletividade da técnica. A partir desse resultado a influência das variáveis tempo de agitação, tamanho da barra, eluente e cinética da reação foram avaliados. De acordo com os resultados, a barra de 1,0 cm apresenta melhor desempenho, sendo que o processo de adsorção apresenta cinética rápida, uma vez que com 5 minutos o equilíbrio já é atingido. Por sua vez, o ácido clorídrico se mostrou mais eficiente no processo de dessorção do metal. Assim, o SrTiO₃ tem se mostrado um adsorvente eficiente, de síntese fácil e de baixo custo, que vem sendo utilizado com êxito no desenvolvimento de metodologias de adsorção em barra, visando a extração/pré-concentração de íons cádmio em amostras aquosas. Nessas condições, o método proposto apresentou limites de detecção e quantificação iguais a 4,45 µg L⁻¹ e 14,83 µg L⁻¹, respectivamente.

Agradecimentos

FAPEG, CAPES, UFG/RC, UFU e CNPq

Referências

1. Erkan Yilmaz, Ismail Ocsoy, Nalan Ozdemir, Mustafa Soyulak, *Analytica Chimica Acta* 906, 110-117, 2016.
2. Ali Mirabi, Ali Shokuhi Rad, Mohammad Reza Jamali e Nasim Danesd, *Australian Journal of Chemistry*. Vol. 69, 314-318, 2015

Microfabricação de dispositivos analíticos em poliéster empregando uma impressora de corte

Nikaele S. Moreira¹ (PG), Cyro L. S. Chagas² (PQ), Karoliny A. Oliveira¹ (PQ), Gerson F. Duarte-Junior¹ (PQ), Fabrício R. de Souza¹ (PQ), Murilo Santhiago³ (PQ), Carlos D. Garcia⁴ (PQ), Lauro T. Kubota^{5,6} (PQ), Wendell K. T. Coltro^{1,5} (PQ).

E-mail: nikaele_sousa@hotmail.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, 74690-900, Goiânia, GO, Brasil.

²Instituto de Química, Universidade de Brasília, 70910-900, Brasília, DF, Brasil.

³Laboratório Nacional de Nanotecnologia do Brasil (LNNano), Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM), 13083-970, Campinas, SP, Brasil.

⁴Department de Química, Universidade de Clemson, 29634, Clemson, SC, USA.

⁵Departamento de Química Analítica, Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, 13084-971, Campinas, SP, Brasil.

⁶Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Bioanalítica, 13084-971, Campinas, SP, Brasil

Palavras-chave: fabricação em polímeros, aplicações bionalíticas, microfluídica, medição à distância.

Os dispositivos microfluídicos em diferentes plataformas vêm se destacando nas últimas décadas, tais como, os fabricados em papéis e polímeros.^{1,2} Dentre os polímeros, tem-se o filme de poliéster que foi empregado para a fabricação de dispositivos poliéster-toner através da impressão a laser, corte (laser de CO₂) e laminação.³ Nesta perspectiva, este trabalho apresenta a fabricação de dispositivos analíticos em poliéster usando impressora de corte e laminadora. O protocolo envolve o design de um layout em um software gráfico, o corte em filmes de poliéster e a laminação contra um ou vários filmes de poliéster revestidos com uma camada termossensível. A viabilidade da abordagem proposta foi demonstrada através da fabricação de placas de 96 micropoços, mistura microfluídica 3D e dispositivos microfluídicos à distância. A impressora permitiu o corte de microcanais maiores que 300 µm em filmes de poliéster com espessura de 250 µm. Os ensaios de uréia e glicose foram realizados em placas de micropoços visando sua quantificação em amostras de urina e soro artificiais. Os resultados alcançados revelaram boa concordância com os valores esperados. A reação de complexação entre Fe²⁺ e o-fenantrolina foi selecionada como modelo para investigar a viabilidade do dispositivo de mistura 3D. As medições de absorvância foram registradas para o produto da reação obtida dentro e fora do chip. Considerando os dados obtidos, a mistura no chip exibiu comportamento semelhante ao da reação fora do chip, demonstrando ser eficiente na execução de misturas devido à turbulência gerada dentro dos canais tridimensionais. Por fim, um dispositivo à distância foi projetado para detectar H₂O₂ com base no deslocamento de um plug de corante promovido pela geração de oxigênio usando uma folha de papel modificada com cobre. Os dados revelaram um comportamento linear na faixa de concentração entre 1 e 5% (v/v) e LOD igual a 0,5%. Portanto, o método proposto representa um protocolo simples e alternativo para produzir microdispositivos, utilizando substrato acessível e barato, dentro de 10 min a um custo <R\$ 0,42 por unidade.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, FAPEG.

Referências

1. Gabriel, E. F. M.; Lucca, B. G.; Duarte, G. R. M.; Coltro, W. K. T. *Anal. Methods*. 2018, 10, 2952.
2. Duarte, G. R.; Price, C. W.; Augustine, B. H.; Carrilho, E.; Landers, J. P. *Anal. Chem*. 2011, 83, 5182.
3. Akyazi, T.; Basabe-Desmonts, L.; Benito-Lopez, F. *Analytica Chimica Acta*. 2018, 1001, 1.

Modelo cinético de precipitação de asfaltenos, usando tolueno como solvente e heptano como antissolvente.

Cristiano F. de A. Júnior¹ (PG), Lidya C. da Silva¹ (PG), Jeferson Valencia¹ (PQ), Felipe P. Fleming² (PQ) e Boniek G. Vaz¹ (PQ). *cristianofrancisco95@gmail.com*

¹Instituto de Química. Universidade Federal de Goiás (UFG)

²Centro de Pesquisas Leopoldo Américo Miguez de Mello (CENPES)

Palavras-chave: asfaltenos, modelo de precipitação, petróleo.

O petróleo pode ser diferenciado através da solubilidade, onde a fração solúvel em n-alcenos é chamada de maltenos (fração essa que engloba os compostos aromáticos, as resinas e os hidrocarbonetos saturados); e a fração insolúvel em n-alcenos, mas solúvel em aromáticos (tolueno e benzeno) é chamada de asfaltenos^[1]. Os asfaltenos apresentam severos problemas de precipitação, devido ao fato de sua solubilidade ser muito sensível a mudanças de pressão, temperatura, concentração, entre outros. De tal modo, com o intuito de conhecer as condições em que a precipitação se produz nessas espécies, e de conhecer também os parâmetros envolvidos nesse fenômeno, estudos vêm sendo realizados para desenhar modelos matemáticos que relacionem esses dados. Koshandam *et al.* propôs um modelo baseado nas etapas da precipitação: Nucleação, Crescimento e Agregação^[2]. Um sistema de equações de derivadas parciais, resolvidas pelo método de Crank-Nicolson, determina o balanço da população de partículas de asfaltenos entre a fase líquida (solução) e a fase sólida (precipitado). O balanço de massa é a igualdade entre a variação negativa no tempo da concentração de asfaltenos na fase líquida e a variação da densidade de partículas que se formam no precipitado. A taxa de crescimento das partículas se baseia no cálculo da supersaturação relativa dos asfaltenos, a qual depende do solvente e do antissolvente, tolueno e heptano, respectivamente. Neste trabalho, os parâmetros de solubilidade de Hildebrand^[3] são correlacionados à equação da supersaturação relativa. Por último, a aglomeração do núcleo depende fundamentalmente da dimensão fractal das moléculas de asfalto, descrita por Duran *et al.*^[4]. Foi obtida uma distribuição de pontos para cada molécula detectada em análises ESI (\pm) Orbitrap-MS, representando seu parâmetro de solubilidade frente ao número de carbonos. Nos gráficos, a amostra de asfaltenos apresenta parâmetros de solubilidade com valores superiores aos observados na amostra de maltenos. Comparando os gráficos de *double bond equivalent* (DBE) para ambas frações, é possível correlacionar que a deficiência de hidrogênio, a qual indica a presença de anéis aromáticos, implica na baixa solubilidade dos asfaltenos em n-alcenos.

Agradecimentos

Agradeço à Petrobras e aos órgãos de fomento, FUNAPE, CAPES e CNPQ, pela realização deste trabalho.

Referências

1. Zuo, P., Qu, S. & Shen, W. *Journal of Energy Chemistry*, 2018.
2. Khoshandam, A. & Alamdari, A. *Energy & Fuels*, 2010, vol. 24, no 3, p. 1917.
3. Panuganti, S. R., Vargas, F. M. & Chapman, Walter G. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2013, vol. 52, no 23, p. 8009.
4. Casas, Y. A., Duran, J. A., Schoeggl, F.F. & Yarranton, H. W. *Energy & Fuels*, 2019, vol. 33, no 11, p. 10687

Monitoramento de determinados parâmetros físicos e químicos das águas subterrâneas de abastecimento público em Goiânia e Aparecida de Goiânia

Nathália K. L. e Silva* (IC)^{1,3}, Regina A. Nogueira (PG)^{1,2}, Lidiane S. de Moraes (IC)^{2,3}, Eliane E. Santos (PQ)³. *nathalia.karoline.lsilva@gmail.com*

¹ Instituto de Química (IQ) - Universidade Federal de Goiás. Av. Esperança, Chácara de Recreios, Samambaia. CEP 74690-900 Goiás, GO, Brasil.

² Escola de Engenharia Civil e Ambiental (EECA) - Universidade Federal de Goiás - Av. Universitária, 488 - Lote Área - Bloco A - CEP 74605-220 Goiânia, GO, Brasil.

³ Centro Regional de Ciências Nucleares do Centro-Oeste (CRCN-CO/CNEN) - Parque Telma Ortegall, BR-60, Km 174,5 - CEP 75345-000 Abadia de Goiás, GO, Brasil.

Palavras-chave: qualidade da água, abastecimento público, água subterrânea, poços, saneamento.

As águas subterrâneas podem ser definidas como aquelas que estão sob a superfície da Terra, entre fissuras, solos e rochas, preenchendo os espaços vazios existentes (BRASIL, 2008). Pelo baixo custo de captação, qualidade e relativa abundância, as águas subterrâneas vêm se mostrando um recurso hídrico essencial para as cidades de Goiânia e Aparecida de Goiânia, contribuindo essencialmente para a manutenção da demanda na região. Assim sendo, este trabalho apresenta o monitoramento de alguns parâmetros físicos e químicos da água subterrânea que abastece grande parte da população de Goiânia e Aparecida de Goiânia. Baseando-se nos critérios da Resolução do CONAMA 396/2008 foram analisados os parâmetros citados na tabela 1. A partir dos valores obtidos, buscou-se acompanhar a qualidade da água e possíveis influências que possam comprometer suas características em relação ao recomendado pela legislação brasileira.

PARÂMETROS	GO1	GO2	GO3	GO4	AP1	AP2	CONAMA 396/08	UNID
CONDUTIVIDADE	109,5	69,3	97,5	166,8	282,0	164,2	NR	µs
pH	7,44	7,84	7,13	6,76	7,5	7,1	NR	-
DUREZA	31,3	20,3	31,9	45,0	72,5	36,9	NR	mg/L
ALCALINIDADE	92,2	63,1	116,4	150,4	242,5	116,4	NR	mg/L
CLORETOS	187,3	217,7	268,4	197,5	308,9	222,8	250.000	µg/L
CADMIO	AD	AD	AD	AD	AD	AD	5	µg/L
CHUMBO	1800	1440	1410	1080	AD	580	10	µg/L
MANGANÊS	489	477	162	147	AD	AD	100	µg/L
ZINCO	AD	37,0	166	58,0	1,0	100	5.000	µg/L
COBRE	AD	AD	AD	AD	AD	AD	2.000	µg/L
FERRO	AD	AD	AD	AD	AD	AD	300	µg/L
CRÔMIO	107	282	327	329	147	267	50	µg/L
SÓLIDOS TOTAIS	213300	165330	180666	254666	266700	119333	1.000.000	µg/L

AD= ABAIXO DO LIMITE DE DETECÇÃO DO EQUIPAMENTO

GO1, GO2, GO3, GO4= POÇOS DE ESTUDO EM GOIÂNIA.

AP1, AP2= POÇOS DE ESTUDO EM APARECIDA DE GOIÂNIA.

Agradecimentos

Os autores agradecem à equipe técnica da SANEAGO S.A. e ao CRCN-CO e também ao CNPq, pela bolsa concedida através do programa de Iniciação Científica

Referências

- 1- BRASIL. Ministério do Meio Ambiente – Resolução CONAMA n.º 396. Classificação e diretrizes ambientais para o enquadramento das águas subterrâneas. Ministério do Meio Ambiente. Brasília, 2008. p 308.

Nanocompósito a base de hidroxiapatita/Fe₃O₄ utilizado como catalisador heterogêneo na degradação do corante azul de metileno

Fausto E. B. Júnior^{1(PG)*}, Maria D. L do Nascimento^{1(IC)}, Willyam R.P. Barros^{1(PQ)}.
*juniorbimbi@hotmail.com**

¹Universidade Federal da Grande Dourados, Rodovia Dourados – Itahum, Km 12, Cidade Universitária, Cx. Postal 533, Dourados-MS, CEP 79804-970, Brasil.

Palavras-chave: hidroxiapatita, processo Fenton, nanopartícula de Fe₃O₄.

O processo Fenton é extensivamente estudado para a degradação de corantes sintéticos, onde baseia-se na reação de H₂O₂ com um catalisador a base de ferro, resultando na produção de •OH [1]. A degradação do corante azul de metileno (AM) usando nanocompósitos (NCs) do tipo Ca₁₀(PO₄)₆(OH)₂/Fe_{3-x}W_xO₄ (x variável) foi investigada com o objetivo de estudar o papel dos íons Fe²⁺/Fe³⁺ e W⁶⁺ no processo. Os NCs foram sintetizados pelo método da co-precipitação [2] e caracterizadas por FTIR, TG-DSC, DRX e MEV. O processo de degradação foi realizado em um reator de compartimento único, onde foram adicionados 100 mL da solução do corante AM (100 mg L⁻¹). O estudo foi conduzido em diferentes pHs: 2,5; 7,0 e 9,0 e foi baseado no processo Fenton, utilizando-se diferentes combinações de H₂O₂, catalisador e processo de fotólise. O volume de H₂O₂ adicionado à solução do corante foi de 1,33 mL e a massa dos NCs de 0,13 g. Destaca-se que foram realizados experimentos de otimização do volume e massa de H₂O₂ e NCs respectivamente. Como fonte de radiação, utilizou-se uma lâmpada de mercúrio 125 W emitindo radiação UVC. Alíquotas da solução do corante AM foram coletadas em momentos específicos e analisadas por espectrofotometria UV/Vis e carbono orgânico total (COT). Como mostrado na tabela, os NCs do tipo Ca₁₀(PO₄)₆(OH)₂/Fe_{3-x}W_xO₄ (x variável) aceleram a degradação do corante AM, e esse efeito é mais pronunciado para os NCs HAP2 e HAP5. A relação estrutura/atividade do NC será discutida em detalhes.

Catalisador	Remoção de cor (%)	Remoção de COT (%)
HAP Ca ₁₀ (PO ₄) ₆ (OH) ₂	89,4	38,7
HAP1 Ca ₄ Fe ^{II} ₂ Fe ^{III} ₄ (PO ₄) ₆ (OH) ₂	100	-
HAP2 Ca ₄ Fe ^{II} _{1,92} W _{0,08} Fe ^{III} ₄ (PO ₄) ₆ (OH) ₂	100	89,7
HAP3 Ca ₃ Fe ^{II} _{2,33} Fe ^{III} _{4,66} (PO ₄) ₆ (OH) ₂	100	-
HAP4 Ca ₃ Fe ^{II} _{2,24} W _{0,09} Fe ^{III} _{4,66} (PO ₄) ₆ (OH) ₂	100	-
HAP5 Ca _{2,5} Fe ^{II} _{2,5} Fe ^{III} ₅ (PO ₄) ₆ (OH) ₂	100	89,1
HAP6 Ca _{2,5} Fe ^{II} _{2,4} W _{0,1} Fe ^{III} ₅ (PO ₄) ₆ (OH) ₂	51,1	-
HAP7 Fe ^{II} _{3,33} Fe ^{III} _{6,66} (PO ₄) ₆ (OH) ₂	100	-
HAP8 Fe ^{II} _{3,2} W _{0,13} Fe ^{III} _{6,66} (PO ₄) ₆ (OH) ₂	100	-

Tabela 1: Remoção de cor e COT durante a degradação do AM pelo processo foto-Fenton heterogêneo em pH 2,5 em um período de 120 min.

Agradecimentos

CAPES, UFGD/PROPP.

Referências

- Brillas E., Sires I., Oturan M.A. Chemical Reviews, 2009, 109, 6570-6631.
- Safavi, A., Momeni, S. Journal of Hazardous Materials, 2012, 201-202, 125-131.

Otimização de um método de extração DPX usando adsorvente natural para adsorção de Pb (II) e Mn(II) e avaliação por isothermas de adsorção.

Marina M. Ferreira¹ PG, Vanessa N. Alves¹ PQ. *marimesquita@gmail.com*

¹Universidade Federal de Goiás, Av. Dr. Lamartine Pinto de Avelar, 1120, Catalão, Brasil.

Palavras-chave: DPX, adsorvente natural, manganês, chumbo, adsorção.

O método de extração com ponteiras descartáveis (DPX) é relativamente novo, consistindo de uma ponteira de micropipeta (1 ou 5 mL), carregada com um sorvente. A amostra é aspirada para o interior da ponteira, ocorrendo sua mistura com o sorvente através da aspiração de ar¹. Nesta técnica, se tem disponíveis comercialmente pequenas quantidades de fases extratoras, que são consideradas de alto custo em relação à SPE convencional, porém é um método que permite o uso de adsorventes alternativos para extração¹. O uso de *Typha angustifolia* L. (taboa) pode ser uma alternativa de fase sólida no desenvolvimento de métodos DPX para a adsorção de íons metálicos, possuindo grande potencial². Assim, o objetivo deste trabalho foi otimizar um sistema DPX alternativo para adsorção de Pb(II) e Mn(II), utilizando a taboa como adsorvente, e, avaliar a capacidade máxima adsorvente do adsorvente através de isothermas de adsorção. Os experimentos foram feitos utilizando ponteiras de 5 mL, seladas na extremidade inferior com lã de vidro, preenchidas com taboa e encaixando na extremidade superior uma seringa para a aspiração de ar/amostra. A análise dos filtrados foi realizada por FAAS. Foi possível verificar que a adsorção dos íons ocorre somente da faixa neutra à básica, assim, o pH 8, foi escolhido para os ensaios subsequentes. Para a otimização da massa de adsorvente, número de ciclos de adsorção e das condições de dessorção (concentração do eluente (HNO₃) e número de ciclos), foram utilizados Planejamentos Doehlert, originando superfícies de resposta, onde os pontos críticos, foram identificados como sendo 31,32 e 28,81 mg de adsorvente para Pb(II) e Mn(II), respectivamente e 7 ciclos de adsorção para ambos os íons. Para as condições de dessorção os valores encontrados foram de 0,8 mol L⁻¹ para a concentração do eluente e 7 ciclos de dessorção. O procedimento das isothermas de adsorção foi realizado no próprio sistema DPX aplicado a 30 mg de taboa em contato com 3 mL de solução dos íons em diferentes concentrações crescentes de 0,05 a 10 mg L⁻¹. Os dados experimentais foram analisados graficamente, e avaliados frente aos modelos de Langmuir, Freundlich e SIPS. Ambos os íons, tiveram o melhor ajuste ao modelo de SIPS, indicando uma adsorção heterogênea. As capacidades máximas adsorvidas foram de 0,2942 mg g⁻¹ e 0,5885 mg g⁻¹ para Pb(II) e Mn(II), respectivamente. A metodologia empregada é simples e de baixo custo, podendo ser aplicada em matrizes complexas.

Agradecimentos

UFG/RC, CAPES, FAPEG, UFU e CNPQ.

Referências

- 1.Pinto, M. A. L., Queiroz, M. E. C., Extração em ponteiras descartáveis: fundamentos teóricos e aplicações, Scientia Chromatografica, 2015, v. 7, 101.
- 2.Demirezen, D., Aksoy, A., Accumulation of heavy metals in *Typha angustifolia* (L.) and *Potamogeton pectinatus* (L.) living in Sultan Marsh (Kayseri, Turkey),Chemosphere, 2004, v. 56, 685.

OTIMIZAÇÃO DO CONTROLE ELETROCINÉTICO EM MICROSSISTEMAS ELETROFORÉTICOS

Maurício matheus I. Pereira¹, Luisa F. C. Ribeiro¹, Kemilly M. P. Pinheiro¹,
Wendell K. T. Coltro^{1,2} (PQ).

E-mail: mauricio.matheus@discente.ufg.br

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, 74690-900, Goiânia, GO, Brasil.

²Departamento de Química Analítica, Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, 13084971, Campinas, SP, Brasil.

Palavras-chave: fabricação em polímeros, aplicações bionalíticas, microfluídica, medição à distância.

A miniaturização está muito presente na química analítica moderna, se destacando por possibilitar análises em um curto espaço de tempo e com baixo custo, empregando volume amostral reduzido e conseqüentemente com baixa geração de resíduos.¹ Dentre os tipos de detectores utilizados em microssistemas eletroforéticos (ME) tem-se a detecção amperométrica (DA) e detecção condutométrica sem contato (C⁴D). Em consequência das vantagens obtidas nos MSE-C⁴D e MSE-DA, tem se observado um crescente estudo para aplicações desta técnica em diversos campos de análise.^{2,3,4} Nesta perspectiva o presente trabalho teve por objetivo otimizar parâmetros instrumentais visando aumentar a sensibilidade na detecção de nitrito por ME-C⁴D e ME-DA para futuras aplicações em amostras reais. Foi otimizado no ME-C⁴D, o tampão de análise, mantendo a concentração de Ácido Lático em 30mmol L⁻¹ e variando as concentrações de Histidina 0,5 a 30mmol L⁻¹, sendo a concentração escolhida 30/25mmol L⁻¹, tempo de injeção do com melhor tempo de 10 s, os potenciais aplicados na injeção e na separação do analito, sendo -1400 na separação e -1000 na injeção. Para avaliar a linearidade do método, foi feita uma curva analítica na faixa de 25 mmol L⁻¹ a 200 mmol L⁻¹. A curva analítica apresentou coeficiente de correlação linear de 0,995 e o limite de detecção igual a 2,98 µmol L⁻¹. Foi otimizado também os parâmetros de análise no ME-DA, sendo estudado o tempo de injeção do analito com melhor tempo de 10 s, foi otimizado também o potencial aplicado no eletrodo de trabalho do microchip. A partir dos resultados, podemos concluir a viabilidade de MSE-C⁴D e MSE-DA como plataformas portáteis, onde podem fazer análises rápidas, menos de 40 segundos, consumo reduzido de amostras e reagentes. Como perspectivas futuras temos os testes com amostras reais e a validação do método.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, FAPEG

Referências

1. Coltro et al, *Química Nova* 30 (2007): 1986.
2. Garcia, Carlos D., and Charles S. Henry. *Analyst* 129.7 (2004): 579-584.
3. Kubáň, Pavel, and Peter C. Hauser. *Electrophoresis* 38.1 (2017): 95-114.
4. Gunawardhana, Shamal M., and Susan M. Lunte. *Analytical Methods* 10.30 (2018): 373

Preparo e caracterização de filmes nanoporosos de WO_3 para aplicação de fotoeletrocatalise.

Giovana M. dos Santos^{1*} (PG), Marly E. Osugi¹ (PQ). gimagalhaes.s@gmail.com

¹Instituto de Química, Campos Darcy Ribeiro – Universidade de Brasília (UnB). CEP: 70904-970, Brasília – DF.

Palavras-chave: Trióxido de tungstênio, semicondutor, anodização, filmes nanoporosos W/ WO_3 .

Dentre os vários óxidos de semicondutores, o trióxido de tungstênio (WO_3) é um bom transportador de carga, apresenta um *band gap* (2,3-2,8 eV) que o torna capaz de absorver luz no espectro visível, além de sua elevada resistência a altas temperaturas e a fotocorrosão, em soluções aquosas.^{1,2} Nesse trabalho, foram preparados pelo processo de anodização eletroquímica, eletrodos com filmes nanoporosos de W/ WO_3 (película fotoativa), variando o potencial aplicado (20V, 40V, 60V) e o tempo (2h, 3h, 4h). A sua caracterização foi realizada através das técnicas de DRX e MEV para a verificação da formação do óxido em sua superfície. Os difratogramas de todos os eletrodos apresentaram os picos características do tungstênio metálico. Os demais picos observados no DRX ($2\theta = 16,5^\circ$; $24,5^\circ$ e $34,5^\circ$; aproximadamente) são responsáveis pela presença do WO_3 , em sua maioria na fase cristalográfica monoclinica.^{2,3} As micrografias eletrônicas de varredura indicaram a formação de filmes nanoporosos semelhantes para os diferentes potenciais aplicados, exceto para o eletrodo que não foi mecanicamente polido. Os diferentes potenciais aplicados no preparo dos eletrodos podem modificar a dispersão das estruturas nanoporosas formadas na superfície metálica e assim interferir na homogeneidade do processo.³ Dessa maneira, o eletrodo com potencial aplicado de 40V apresentou uma superfície nanoporosa mais uniforme, dentre os demais, sendo a alternativa mais promissora para a aplicação em processos fotoeletrocatalíticos.

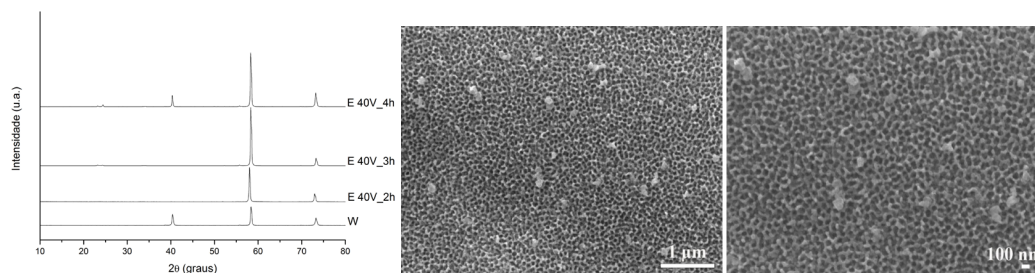


Figura 1. DRX dos eletrodos (potencial aplicado de 40V) e MEV do eletrodo de potencial aplicado de 40V, por 4 horas.

Agradecimentos

Ao auxílio acadêmico da orientadora Prof^a. Dra. Marly Eiko Osugi, ao apoio dos colegas do IQ, ao apoio do laboratório de Microscopia do Instituto de Biologia da UnB e ao apoio financeiro do ProIC/DPP/UnB e MCTI/CNPq (n^o: 483682/2013-6).

Referências

1. Parthibavarma M., Karthik M., Prabhakaran, Vacuum, 2018, 155, 224 – 232;
2. Fernández-Dormene, R. M., et al., Chemical Engineering Journal, 2016, 286, 59 – 67;
3. Zheng, Q., et al., Electrochimica Acta, 2014, 115, 140 – 145;
4. Kanda – Nishikicho, et al., Applications News – spectrophotometric analysis, 1966 – 1972, A428.

Quantificação de carbono orgânico do solo por meio da espectroscopia de infravermelho

Pedro A. O. Morais^{1,2} (PG), Diego M. Souza¹ (PQ), Beata E. Madari² (PQ), Anselmo E. Oliveira¹ (PQ). *pedro_augusto_04@hotmail.com*

¹Laboratório de Química Teórica e Computacional, Instituto de Química, UFG, Goiás, 74690-

900 ²Embrapa Arroz e Feijão, Santo Antônio de Goiás, Goiás, Brasil, 75375-000 Palavras-chave: análise de solo, MIR, PLS, SPA-MLR, LS-SVM.

Introdução: A determinação do carbono orgânico do solo (COS) é uma solicitação bastante requisitada aos laboratórios de análise de solo. Geralmente, o COS é quantificado pelo método Walkley-Black¹, de baixa produtividade e que utiliza reagentes de alta toxicidade. COS é determinado em duas etapas: a) oxidação do carbono utilizando dicromato de potássio em meio ácido; e b) determinação do excesso de dicromato por meio de titulação. Nesse procedimento, os analistas estão expostos a vários riscos de acidentes e, ao final de cada análise, um volume de resíduo é gerado e deve ser tratado anteriormente ao descarte. Diante disso, com a finalidade de proporcionar um ambiente de menor risco aos analistas, assim como de reduzir consideravelmente o passivo ambiental, este trabalho apresenta uma metodologia para determinação do COS por espectroscopia de infravermelho médio (MIR).

Material e métodos: Um conjunto de 177 amostras de solo de diferentes regiões do país foi considerado. Os teores de COS foram determinados por meio do método Walkley-Black. Os espectros MIR foram obtidos utilizando um espectrômetro Varian 660 FT-IR, na faixa espectral de 4000 a 400 cm⁻¹ com resolução de 8 cm⁻¹. Após a obtenção dos espectros, as amostras foram subdivididas em 124 de calibração e 53 de validação por meio do algoritmo SPXY². Posteriormente, os espectros de MIR foram correlacionados com os teores de COS por meio dos métodos: Regressão parcial de mínimos quadrados (PLS), algoritmo das projeções sucessivas associado a regressão linear múltipla (SPA-MLR) e Máquinas de vetor de suporte com mínimos quadrados (LS-SVM).

Resultados e discussões: Os resultados obtidos na determinação do COS por meio de espectros MIR estão expostos na Tabela 1.

Tabela 1. Resultados estatísticos na quantificação de COS por meio dos métodos PLS, SPA-MLR e LSSVM.

Método	NV ^a	LV ^b	R ² cal ^c	RMSEC ^d	R ² val ^e	RMSEP ^f	RPD ^g
SPA-MLR	15	-	0,8540	4,0	0,8060	4,6	2,2
PLS	-	12	0,9155	3,0	0,8722	3,8	2,7
LS-SVM	-	-	0,9437	2,5	0,9057	3,3	3,2

^aNúmero de variáveis selecionadas pelo algoritmo das projeções sucessivas (SPA); ^bVariáveis latentes; ^cCoefficiente de correlação ao quadrado da calibração; ^dRaiz Quadrada do Erro Médio Quadrático da Calibração; ^eCoefficiente de correlação ao quadrado da validação; ^fRaiz Quadrada do Erro Médio Quadrático da Validação; ^gDesvio de Previsão Residual;

Os métodos PLS e LS-SVM apresentaram desempenhos similares. Por outro lado, a ferramenta LS-SVM apresentou um valor de RPD superior a 3,0, o que classifica esse modelo como excelente.

Conclusão: A metodologia para quantificação de COS por meio de espectros MIR é rápida, não destrutiva, não gera resíduo tóxico e ainda assegura um ambiente de trabalho mais seguro aos laboratoristas.

Agradecimentos: CNPq e CAPES.

Referências

1.Walkley A, Black IA., Soil Science, 37, 1934, 29. 2. Galvão RKH, Araújo MCU, José GE, Pontes, MJC, Silva EC, Saldanha TCB. A method for calibration and validation subset partitioning. Talanta, v. 67, n. 4, 2005.

Tratamento de efluente contendo paracetamol com fotocatálise a partir de diodo de luz (LED)

Karollayne R. Reis^{1,2} (IC), Rejane D. P. Mota¹ (PQ), Thiago J. Corrêa³ (PQ), Brendo A. T. dos Santos² (IC), Eduarda A. Prieto² (IC), Ítala L. M. Santos² (IC), Karen S. Marinho² (IC), Milenia C. Souza² (IC), Felipe M. A. Souza¹ (IC). *reiskarollayne79@gmail.com*

¹ Instituto Federal de Goiás, Campus Anápolis, Goiás, Brasil.

² Faculdade de Tecnologia SENAI Roberto Mange, Anápolis, Goiás, Brasil.

³ Faculdade Católica de Anápolis, Goiás, Brasil.

Palavras-chave: Paracetamol, Resíduo, LED, Fotocatálise, Turbidímetro.

Diariamente indústrias farmacêuticas liberam todos os tipos de efluentes com inúmeros componentes, um desses componentes pode ser o paracetamol, um medicamento usado em larga escala pela população como analgésico e antitérmico¹. Esses efluentes industriais, quando lançados imprudentemente sobre a natureza, podem causar danos ambientais, contaminação das águas subterrâneas, doenças na fauna aquática, dentre outros problemas. Esse projeto de pesquisa teve como objetivo desenvolver um método para auxiliar a indústria farmacêutica, no tratamento de resíduos de paracetamol (N-(4-hidroxifenil) etanamida), a fim de diminuir a poluição ambiental por esse fármaco. O paracetamol é um fármaco sensível em relação à luz e foi tratado com ondas eletromagnéticas usando o LED (Light Emitting Diode), as cores escolhidas foram com base na escala de espectro visível e invisível: o laranja por sua grande onda (maior velocidade de propagação e sua intensidade), o roxo foi selecionado por ser uma cor fria (ter um comprimento de onda menor podendo ser mais eficaz para o tratamento do fármaco); já o UV (Ultra Violeta) foi escolhido por estar no espectro não visível a olho nu e por ser forte em relação a sua radiação. A partir disso foi feita uma investigação a fim de obter o melhor comprimento de onda que degradava o paracetamol. Foi usado o processo fotocatalítico, esse processo está integrado ao POA (Processos Oxidativos Avançados), que equivale a um modo mais rápido de degradação do poluente através da irradiação de catalisadores. Foi usado o turbidímetro com o objetivo de medir a turvação da solução do composto, para se ter resultados significativos de absorbância². Durante a investigação os LEDs laranja, ultravioleta e roxo, tiveram desempenhos significativos em relação aos resultados esperados com o tratamento, diminuição do teor de paracetamol nas amostras, conforme pode ser visualizado pela Tabela 1.

Tabela 1: Resultado da análise de turbidímetro

Ambiente Tempo	Luz branca	Laranja	UV	Roxo	Laranja (aquecido)
Uma hora	Queda de 15 NTU	Queda de 15 NTU	Queda de 19 NTU	Queda de 12 NTU	Queda de 10 NTU
Duas horas	Queda de 7 NTU	Queda de 8 NTU	Queda de 6 NTU	Aumento de 3 NTU	Aumento de 1 NTU
Total	Queda de 22 NTU	Queda de 23 NTU	Queda de 25 NTU	Queda de 9 NTU	Queda de 9 NTU

Fonte: Autoria própria.

Referências

- LOPES J.; MATHEUS, M. E. Risco de hepatotoxicidade do paracetamol (acetaminofem). **Rev.Bras Farm.** 2012; 93: 411-414.
- NOGUEIRA, R. F. P.; JARDIM, W. F. A fotocatálise heterogênea e sua aplicação ambiental. **Quím. Nova** vol.21 no.1 São Paulo Jan./Feb. 1998.

Ácidos Maleâmicos *N*-Substituídos Complexados com Íons Cu(II): Sínteses e Caracterizações

Adrielli T. Sobral¹ (IC), Maria A. H. Benuncio¹ (IC), Roberto S. Gomes¹ (PQ), Bárbara Tirloni² (PQ) e Eliandro Faoro¹ (PQ).

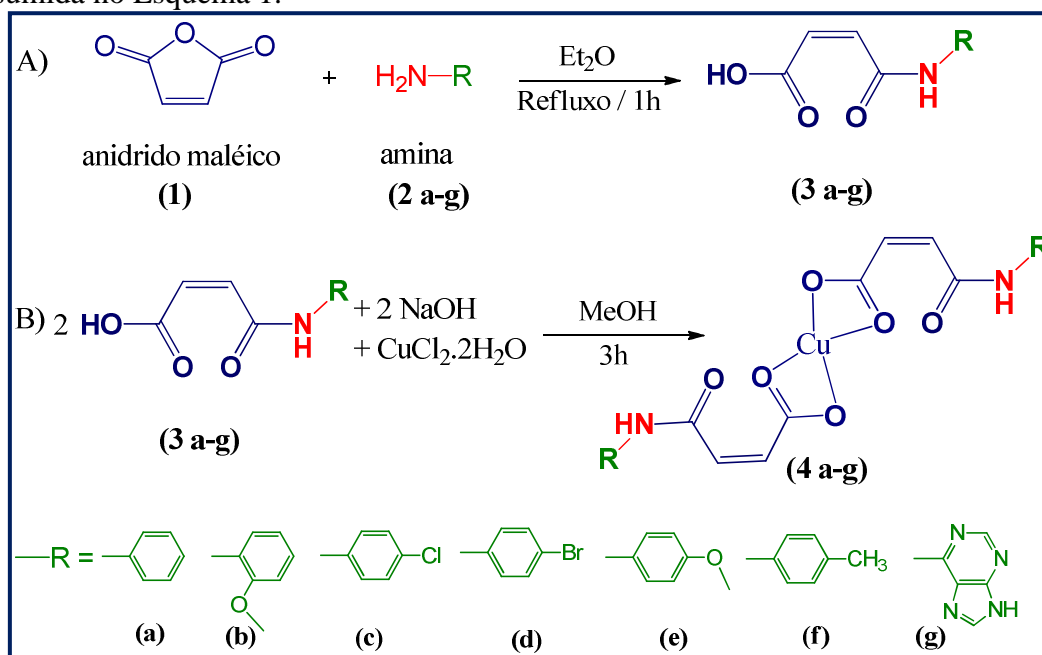
adrielli_sobral@hotmail.com

¹ Universidade Federal da Grande Dourados, Dourados-MS

² Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria-RS

Palavras-chave: Compostos de coordenação, ácidos maleâmicos *N*-substituídos, difratometria de raios X

Atualmente, dentro da química de coordenação, destacam-se pesquisas voltadas a química inorgânica medicinal, gerando metalofármacos que levam a um aumento da biodisponibilidade¹. Dentre os ligantes bioativos, poucas pesquisas estão sendo desenvolvidas com ácidos maleâmicos *N*-substituídos, contudo, alguns resultados mostram que a utilização dessa classe de ligantes no tratamento de células tumorais pode ser muito promissora². Neste sentido, o presente trabalho apresenta a síntese e caracterização de uma série de complexos de cobre(II) com essa classe de ligantes. A metodologia sintética utilizada para a obtenção dos ligantes e complexos encontra-se resumida no Esquema 1.



Esquema 1. Rotas sintéticas para obtenção dos ligantes (A) e complexos (B).

Esses complexos foram caracterizados por espectroscopia vibracional no IV, TG/DSC e difratometria de raios X.

Agradecimentos

UFGD, Fundect, CNPq e FINEP.

Referências

- Palmer, A. E.; Franz, K. J. *Chemical Reviews*, 2009, 109, 4533-4535.
- Roselen, D., Noldin, V. F., Winter, E., Filippin-Monteiro, F. B., Campos-Buzzi, F., Cechinel-Filho, V., Creczynski-Pasa, T. A. *Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry*, 2015, 15, 1164-1173.

Acoplamento magnético em polímero de coordenação de manganês

Maykon A. Lemes (PQ), Felipe T. Martins (PQ) e Danielle Cangussu (PQ).
 maykonlemes@ufg.br

Instituto de Química - UFG, Goiânia, GO.

Palavras Chave: Magnetismo molecular, interação magnética, polímero de coordenação, metais de transição.

O estudo da comunicação eletrônica entre unidades paramagnéticas que compõem estruturas moleculares representa uma importante etapa na otimização das propriedades magnéticas de complexos que se comportam como ímãs moleculares. Isso se dá pois a natureza e a magnitude dessas interações pode proporcionar um aumento do spin total da molécula assim como a minimização ou supressão da quantização da magnetização. Sendo esse último o fator determinante na redução da barreira energética para a reversão da magnetização dos spins. Dessa forma, estudos baseados em análise cristalográfica e cálculos teóricos contribuem para avaliar teoricamente o comportamento magnético em complexos metálicos paramagnéticos.¹ Nesse sentido, esse trabalho apresenta uma abordagem teórica para a estimativa das interações magnéticas em um polímero de coordenação de manganês (Mn^{II}).

A estrutura cristalográfica do polímero de coordenação [Mn^{II}(ampyz)(CH₃COO)₂(H₂O)]_n é apresentada na Fig. 1.

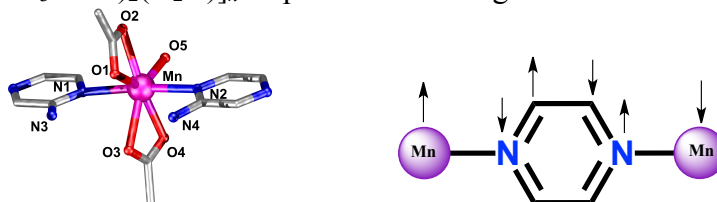


Figura 1. Estrutura cristalográfica molecular do complexo de Mn^{II} (direita) e a esquerda a projeção antiferromagnética estimada por polarização de spins via Mn-N-C-C-N-Mn.

As propriedades magnéticas foram avaliadas através dos centros metálicos que compõem o polímero {Mn^{II}}. Nesse sistema a comunicação eletrônica (interação magnética) ocorre via super-troca através do ligante aminopirazina (ampyz). A distância intramolecular desses centros metálicos é de 7.45 Å e análise preliminar do acoplamento por polarização de spin indica interação antiferromagnética entre Mn-Mn.

Uma vez que o íon Mn^{II} possui configuração eletrônica 3d⁵ e L = 0, esse sistema permite a aplicação de um Hamiltoniano isotrópico levando-se em consideração apenas as interações do tipo spin-spin. Dessa forma, o cálculo foi realizado utilizando o software *PHI* para a resolução do Hamiltoniano descrito simplificadamente como $H = -JS_1 \cdot S_2$, onde $S_1 = S_2 = 5/2$, $g = 2.00$ e a constante de acoplamento (J) com valores entre $(\pm)5$ e $(\pm)0.1 \text{ cm}^{-1}$; Sendo (+) interação de natureza ferromagnética e (-) antiferromagnética. Nessa etapa, os valores de J testados foram selecionados de acordo com o banco de dados da literatura para interação magnética em complexos de Mn^{II}.

Com base nesses dados, a simulação que apresentou resultados que melhor descreve o comportamento magnético Mn-Mn indica acoplamento do tipo antiferromagnético. Simulação utilizando valores que indicam interação ferromagnética resulta em curvas de magnetização não sobrepostas (indicativo da presença de anisotropia magnética) e dessa forma esses resultados foram descartados.

Referências: ¹ S. Demir, I.-R. Jeon, J. R. Long, T. D. Harris. *Coord. Chem. Rev.* **2015**, 290, 149.

Catalisadores de níquel na hidrogenação de óleos residuais do processo de produção de biodiesel

Marina R. A Santos^{1,2} (IC), Vannia C. dos Santos-Durndell¹ (PQ), Gustavo A. da Costa² (PG), Diogo K. Nakai¹ (PQ), Itânia Pinheiro Soares¹ (PQ)
marinasantos38@gmail.com

¹Embrapa Agroenergia, W3 norte final s/n, Brasília- DF, 70770901.

²Universidade de Brasília - Darcy Ribeiro L2 Asa Norte s/n, Brasília - DF, 70910-000

Palavras-chave: óleos ácidos, hdo, diesel verde

Apesar do grande avanço na tecnologia para a produção do biodiesel, o setor ainda tem alguns desafios a vencer para alcançar resultados ainda mais expressivos. Um desses desafios está relacionado a uma destinação adequada dos resíduos do processo de produção. Nas etapas de separação e purificação do biodiesel, é gerada uma grande quantidade de resíduos compostos por triglicerídeos remanescentes, ésteres, ácidos graxos livres, glicerol, metanol e outros. Uma alternativa seria seu reprocessamento para produzir mais biodiesel. No entanto, devido ao tratamento ácido requerido pode ocasionar danos aos reatores utilizados [1]. Apesar das diversas vantagens da utilização do biodiesel, algumas desvantagens estão relacionadas ao fato de ser um combustível oxigenado e, portanto, apresentar um menor poder calorífico que o diesel. Além disso, a presença de insaturações o torna menos estável e sujeito a oxidação [2]. Uma alternativa para a destinação adequada para os resíduos da produção de biodiesel, e ainda gerar um combustível mais estável seria sua utilização como matéria prima para a produção do *green diesel* por meio do processo de hidroxidação (HDO), amplamente utilizado na indústria petroquímica (hidroprocessamento). Esse combustível, não oxigenado e saturado teria a constituição do diesel de petróleo, por isso, chamado de *green diesel*. Sendo assim, neste trabalho foram testados catalisadores de níquel impregnados em aluminossilicatos em reações de hidrogenação de óleos residuais do processo de produção de biodiesel, para obtenção de hidrocarbonetos (diesel verde, ou *green diesel*). Para tanto, foram utilizados os catalisadores Ni/Al-MCM-41(55) e Ni/ZSM-5(55), onde 55 representa a razão molar Si/Al; pressão de H₂ de 20 bar, por um período de 6 horas, a uma temperatura de 260 °C. Utilizando Ni/Al-MCM-41(55) as conversões dos ácidos oleico e linoleico, foram de 40 e 100%, respectivamente enquanto que utilizando Ni/ZSM-5(55) as conversões dos ácidos oleico e linoleico, foram de 25 e 80%, respectivamente. No entanto, a formação de hidrocarbonetos utilizando o catalisador Ni/ZSM-5(55) esteve próxima de 30%, ao passo que não foi observada utilizando o catalisador Ni/Al-MCM-41(55).

Agradecimentos

Embrapa e CNPq

Referências

[1] Lee, A.F.; Wilson K., *Catalysis Today*, 2015, 242, 3.

[2] Pattanaik, B.P.; Misra, R.D. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2017, 73, 545.

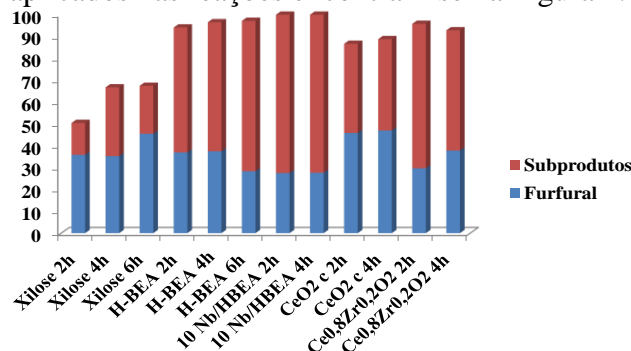
Catalisadores heterogêneos na desidratação de xilose a furfural

Maria Clara H. Clemente^{1,*} (PG), Deborah S. Valadares¹ (PG), Gesley Alex V. Martins¹ (PQ), Sílvia Cláudia L. Dias¹ (PQ), José A. Dias¹ (PQ). *E-mail: mrclara01@gmail.com.

¹Universidade de Brasília, Instituto de Química, 70904-970, Brasília DF.

Palavras-chave: biomassa, xilose, furfural, catalisadores ácidos.

Biomassa é fonte sustentável de carbono para a produção de insumos químicos devido a sua alta disponibilidade e biodegradabilidade, características que a tornam uma alternativa à utilização do petróleo como matéria-prima na indústria.^{1,2} Furfural é um candidato a bloco de construção derivado de biomassa e sua plataforma química possui ampla aplicação na indústria.¹ Sua produção a partir da biomassa ocorre através da hidrólise ácida de hemicelulose gerando açúcares de cadeia C5 como a xilose. Em seguida, o açúcar é desidratado e o produto furfural é obtido.³ Para que o equilíbrio das reações de hidrólise seja atingido de forma mais rápida utiliza-se, normalmente, catalisadores ácidos. Essa é até agora a forma mais eficaz e barata de se obter furfural a partir da biomassa. No entanto, a maioria dos processos ainda são realizados com catalisadores ácidos minerais e homogêneos como H₂SO₄.⁴ De forma a otimizar as reações químicas e resíduos gerados, catalisadores heterogêneos têm sido estudados na desidratação de açúcares como a xilose.⁵ Dessa forma, o objetivo desse trabalho foi aplicar catalisadores ácidos heterogêneos na desidratação de xilose a furfural na proporção de 1:5, catalisador:xilose. A reação ocorreu em autoclave de teflon com água (12,44 mL) sob agitação magnética 300 rpm e 180 °C. As amostras foram analisadas por cromatografia líquida com detector por índice de refração (HPLC-RID) com H₂SO₄ 25 mmol L⁻¹ como fase móvel. A conversão e seletividade dos catalisadores aplicados nas reações encontram-se na Figura 1.



A reação sem catalisador, xilose pura, apresentou elevada seletividade para furfural após 6 horas de reação. No entanto, a conversão de xilose foi menor se comparada às reações contendo catalisador. Nota-se que elevada acidez de Brønsted (zeólita H-BEA) permite elevada conversão da xilose, mas baixa seletividade.

Figura 1. Conversão de xilose e seletividade para furfural

Os catalisadores de óxidos, principalmente a céria comercial (CeO₂ c), apresentaram tanto elevada conversão quanto seletividade para furfural. A capacidade de estocagem de oxigênio presente em sua estrutura oxida o coque evitando o envenenamento do catalisador.⁶

Agradecimentos

IQ/IB/UnB, MCT/CNPq, CAPES, FINATEC, FAPDF, FINEP/CT-Infra, e Petrobras.

Referências

- Galaverna, R. & Pastre, J. C. Rev. Virtual Quim., 2017, 9, 248.
- Halilu, A. *et al.* Energy & Fuels, 2016, 30, 2216.
- Ribeiro, P. R., Carvalho, J. R. M., Geris, R., Queiroz, V. & Fascio, M. Quim. Nova, 2012, 35, 1046.
- Liu, L., Chang, H. min, Jameel, H. & Park, S., Bioresour. Technol., 2018, 252, 165.
- Liu, Q., Liu, Q., Hu, X., Catal. Commun., 2020, 135, 105836.
- Clemente, M. C. H., Martins, G. A. V.; Freitas, E. F., Dias, J. A., Dias, S. C. L., Fuel, 2019, 239, 491.

Complexo de Cd(II) derivado de um ligante do tipo oxamato funcionalizado: Síntese e Caracterização

Jhonny W. O. Maciel¹ (PG), Meiry E. Alvarenga¹ (PG), Maykon A. Lemes¹ (PQ), Felipe T. Martins¹ (PQ), Danielle C. C. Gomes¹ (PQ). *jhonnywmaciell@gmail.com*.

¹Instituto de Química - Universidade Federal de Goiás, Campus Samambaia 74001-970, Brasil.

Palavras-chave: Cádmio(II), e oxamato.

A preparação e compostos de coordenação com ligantes do tipo oxamato tem sido bastante explorada nas últimas décadas com inúmeros exemplos de onde a estratégia de síntese leva a diferentes topologias estruturais e propriedades físicas.^{1,2} Neste trabalho, apresentamos os resultados estruturais relativos a formação de complexo entre o íon de cádmio(II) com o ligante ácido N-(4-carboxifenil) oxâmico etil éster (EtH₂pcpa).

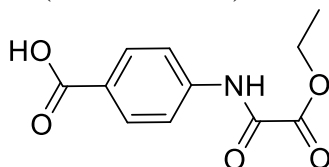


Figura 1. Esquema do ligante EtH₂pcpa.

Para a síntese do complexo foi utilizada a técnica de difusão lenta em tubo na forma de H, e após três semanas, observou-se o aparecimento de cristais incolores ao longo do tubo. A estrutura do complexo metálico de fórmula $\{[\text{Cd}_2(\text{Hpcpa})_2(\text{H}_2\text{O})_6] \cdot \text{H}_2\text{O}\}_n$ foi determinada por difração de raios-X de monocristal.

O complexo formou cadeias em ziguezague neutras de íons Cd(II) unidos por ligantes Hpcpa²⁻, onde a unidade assimétrica contém dois íons de Cd(II) em que Cd1 é hepta-coordenado com três moléculas de água, dois oxigênios-oxamato de um ligante Hpcpa²⁻ e dois oxigênios-oxamato de outro ligante Hpcpa²⁻, enquanto Cd2 é hepta-coordenado com três moléculas de água, dois oxigênios-carboxilato de um ligante Hpcpa²⁻ e dois oxigênios-carboxilato de outro ligante Hpcpa²⁻. A separação intracadeia entre os íons metálicos Cd1...Cd2 é de 11,5316(8) Å.

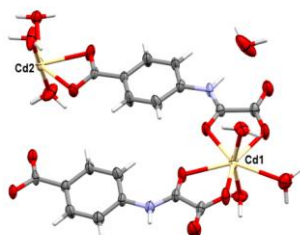


Figura 2: Unidade assimétrica de $\{[\text{Cd}_2(\text{Hpcpa})_2(\text{H}_2\text{O})_6] \cdot \text{H}_2\text{O}\}_n$. Os elipsoides estão desenhados ao nível de probabilidade de 50%.

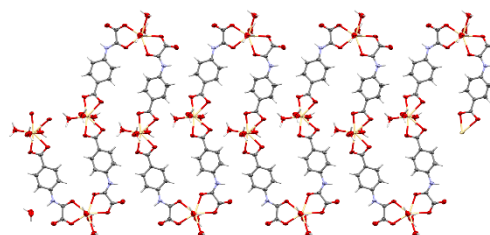


Figura 3: Fragmento de uma cadeia neutra em ziguezague de $\{[\text{Cd}_2(\text{Hpcpa})_2(\text{H}_2\text{O})_6] \cdot \text{H}_2\text{O}\}_n$.

Foi obtido um composto inédito que foi caracterizado por difração de raios-X de monocristal e espectroscopia na região do infravermelho até o momento.

Agradecimentos

UFG, CNPq, CAPES e FAPEG.

Referências

1. Maciel J, Kalinke L, Valdo A, et al. *J Braz Chem Soc.* 2019;30(11):2413-2429.
2. Oliveira TL, Kalinke LHG, Mascarenhas EJ, et al. *Polyhedron.* 2014;81:105-114.

Compósitos de grafeno amassado decorado com NiCo_2O_4 para detecção amperométrica de glucose

*Thiago S. D. Almeida¹ (PG), Rodrigo V. Salvatierra² (PQ) Victor H. R. Souza¹ (PQ).
thiago.santos.almeida@outlook.com

¹ Universidade Federal da Grande Dourados (UFGD); Faculdade de Ciências Exatas e Tecnologia (FACET), Dourados, MS, Brasil.

² Department of Chemistry, The NanoCarbon Center, and Department of Materials Science and Nano Engineering, Rice University.

Palavras-chave: grafeno, cobaltita de níquel, sensores eletroquímicos, glucose.

A glucose é um monossacarídeo de extrema importância na biologia, desempenhando funções importantes no corpo humano. Estudos recentes apresentam certa preocupação com aumento de pessoas diagnosticadas com diabetes, uma doença provocada pela elevação da glucose no sangue. Neste sentido, médicos e pacientes necessitam de métodos eficientes para determinação da concentração de glucose no sangue, e que sejam precisos, confiáveis e rápidos, além de baratos e fáceis de usar. Atualmente, várias técnicas são aplicadas no monitoramento de glucose, como métodos ópticos, com a utilização de biossensores colorimétricos e sensores eletroquímicos.[1] A utilização de sensores eletroquímicos é interessante por serem altamente sensíveis, de baixo custo, simples, com resposta rápida e com a possibilidade de utilização de materiais nanométricos, como o grafeno.[1] O grafeno é um material muito interessante por apresentar propriedades pronunciadas, como elevada área superficial, elevada transmitância ótica e elevada condutividade eletrônica.[2] Os óxidos de espinel de metais de transição mistos apresentam elevada atividade para aplicação em sensores eletroquímicos.[3] Neste contexto, nós sintetizamos e investigamos a atividade dos compósitos de grafeno amassado (crumpled graphene – CG) decorados por cobaltita de níquel (NiCo_2O_4). A síntese foi realizada em uma única etapa, em um processo de spray pirólise. O grau de recobrimento do CG foi controlado através da concentração do precursor metálico (proporções de CG/Ni/Co: 1:1:1; 1:3:3; 1:5:5 (massa/massa)). Os compósitos foram caracterizados por medidas eletroquímicas em meio básico, apresentando um perfil característico de NiCo_2O_4 , além de mostrar boas respostas para a detecção de glucose. Adicionalmente, os materiais foram caracterizados por técnicas de microscopia eletrônica de varredura e transmissão, evidenciando a morfologia característica de crumpled graphene decorados com NiCo_2O_4 , observando o recobrimento da superfície do nanomaterial carbonáceo. Constatou-se uma relação direta entre o aumento da proporção dos metais e aumento no recobrimento do grafeno amassado. Um estudo sistemático será realizado para a detecção de glucose para os diferentes compósitos, com objetivo de obter resultados satisfatórios para os limites de detecção e seletividade do analito.

Agradecimentos

À CAPES, CNPq (423918/2018-4), INCT em Nanomateriais de Carbono (Fapemig, CAPES e CNPq), GQM/UFPR.

Referências

- 1.. Chen, D., Pang, D., Zhang, S., Song, H., Zhu, W., Zhu, J. *Electrochimica Acta*, 2020, 330, 135326.
2. Zhu, Y., Murali, S., Cai, W., Li, X., Suk, J. W., Potts, J. R., & Ruoff, R. S. *Advanced materials*, 2010, 22(35), 3906.
3. Rao, H., Zhang, Z., Ge, H., Liu, X., Zou, P., Wang, X., & Wang, Y. *New Journal of Chemistry*, 2017, 41(9), 3667.

Desidratação da frutose para HMF: Catalisadores e Desafios

João P. V. Lima^{*1} (PG), Pablo T. A. Campos¹ (IC), José A. Dias¹ (PQ), Sílvia C. L. Dias¹ (PQ), José J. L. León¹ (PQ).

¹ Universidade de Brasília, Instituto de Química, Laboratório de Catálise, 70910-900, Brasília-DF.

*jpvieiralima123@gmail.com

Palavras-chave: Catálise heterogênea, frutose, 5-hidroximetilfurfural.

O petróleo ainda é a principal matéria-prima para a produção de químicos e combustíveis no cenário mundial. Estima-se que o petróleo seja a fonte de mais de 96% de produtos químicos que contenham carbono, utilizados diariamente em nossa sociedade em quantidades colossais.^{1,2} O emprego de matérias-primas não-renováveis implica em uma série de dificuldades. Dentre elas, destacam-se a nocividade ao meio ambiente e os problemas políticos e geográficos inerentes às suas reservas, além do esgotamento futuro inevitável das mesmas. Tendo em mente tais problemas, alternativas mais sustentáveis vêm sendo buscadas, e uma delas diz respeito à molécula 5-hidroximetilfurfural (HMF). O HMF é considerado uma molécula plataforma, ou seja, a mesma funciona como um intermediário para diversos produtos de interesse, como plásticos, fármacos, substâncias de química fina e, especialmente, combustíveis.² No presente trabalho, foi desenvolvido um sistema capaz de gerar HMF através da desidratação de carboidrato, especificamente da frutose. É interessante destacar que o processo por um todo descartou o emprego de solvente orgânicos, que acabam por fazer com que o processo se desvie da iniciativa “verde” e sustentável. Para tal reação, testaram-se diversos catalisadores, todos heterogêneos em relação ao meio reacional (procedimento mais interessante a nível industrial), a saber: as zeólitas HY, HBEA e HZSM-5; além do pentóxido de nióbio (Nb₂O₅). Comparações foram traçadas com o branco (reação sem catalisador), e algumas modificações nos catalisadores também serão apresentadas, o que gerou uma varredura muito completa de catalisadores para a reação. Os resultados foram muito satisfatórios, principalmente no caso do pentóxido de Nióbio, conforme observado na Figura 1.

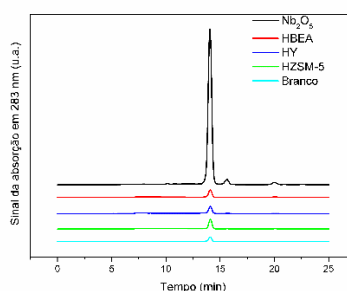


Figura 1: Análise por Cromatografia Líquida de Alta Eficiência (CLAE) acoplado a espectrofotômetro UV (ultravioleta) fixado em 283 nm, onde o HMF apresenta pico de absorção proporcional à sua concentração. Condições reacionais: 1 grama de frutose, 30 mL de água milli-Q, 120 °C, 2 h e 10% massa de catalisador.

Agradecimentos

A Deus, aos professores Sílvia, Joaquin e José pelos ensinamentos, ao MCTIC-CNPq, CAPES, FAP-DF, FINEP-CTInfra.

Referências

1. Kazi, F. K., Patel, A. D., Serrano-Ruiz, J.C., Dumesic, J.A., Anex, R. P., Chemical Engineering Journal, 2011, 169, 329.
2. Liu, J., Tang, Y., Wu, K., Bi, C., Cui, Q., Carbohydrate Research, 2012, 350, 20.

Redução Hidrotermal de platina em carbono comercial para aplicação em células a combustível com camada difusora aberta e fechada

Maria Clara H. Clemente (PG)^{1,*}, Camila Cafe D. S. Campos (IC)¹, Rayane da S. Cardoso¹ (IC), Gesley A. V. Martins¹ (PQ). *E-mail: mrclara01@gmail.com.

¹Universidade de Brasília, Instituto de Química, 70904-970, Brasília DF.

Palavras-chave: célula a combustível, camada difusora, platina, redução.

A célula a combustível é uma célula eletroquímica que transforma energia química em energia elétrica a partir do hidrogênio. É composta de um ânodo e um cátodo constituídos de uma camada de material poroso de carbono, no qual, em um dos lados das camadas serão depositadas as nanopartículas de platina.^{1,2}

Neste trabalho uma suspensão de carbono comercial em solução de platina (IV) foi dispersa em camada difusora aberta e fechada. Em seguida, o sistema foi inserido em autoclaves para redução hidrotermal com ácido fórmico (CH₂O₂) como agente redutor (Figura 1). Para a análise do material é feito o DRX que permite determinar a estrutura da platina e seus planos de difração. Posteriormente é calculado o tamanho das partículas de platina, utilizando a equação de Scherrer no pico 67° 2θ.

O ácido fórmico como agente redutor teve excelente desempenho na redução da platina sobre a camada difusora de carbono, principalmente, em temperaturas em torno de 120°C. A distribuição dos aglomerados de nanopartículas foi satisfatória para uso em células a combustível, já que estas nanopartículas não adentraram na camada difusora fechada, permanecendo na superfície. Entretanto na camada difusora aberta não obtivemos um resultado tão satisfatório, pois a suspensão adentrou a camada, diminuindo a área superficial do catalisador exposta ao eletrólito PBI (polibenzimidazol). As curvas de polarização (Figuras 2 e 3) apresentam a melhor densidade de potência tanto para o sistema montado com camada difusora aberta como para fechada. A temperatura de operação de 200 °C apresentou os melhores resultados de densidade de potência.



Figura 1. Aparatos para redução hidrotermal.

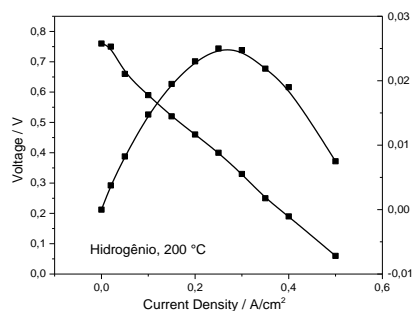


Figura 2. Curva de polarização com camada aberta.

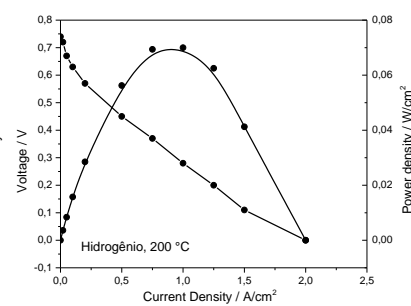


Figura 3. Curva de polarização com camada fechada.

Agradecimentos

Ao IQ/UnB pelo apoio institucional, ao Pesquisador Dr. Rude Crisafulli e ao Professor Dr. José Joaquin Linares pelo empréstimo da célula a combustível para os testes.

Referências

1. EG&G TECHNICAL SERVICES, Inc. Fuel cell handbook. 7th ed. Choice Reviews Online, United States, 2004, 26, 26.
2. HOOGERS, G. *et al.* Fuel Cell Technology Handbook. United States: CRC Press, 2003.

Sais de bis-benzimidazólio próticos como organocatalisadores para a síntese sustentável de carbonatos cíclicos

Werberson A. Bezerra¹(IC), Jorge L. S. Milani²(PQ), Rafael P. das Chagas¹(PQ).
werberson.98@hotmail.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, GO, Brazil.

²Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Juiz de Fora, MG, Brazil.

Palavras-chave: Dióxido de carbono, Carbonatos cíclicos, Sais de bis-benzimidazólio, Organocatalisadores, Catalise homogênea.

A dependência das fontes fósseis de carbono e a rápida deterioração do ambiente são dois fatores que instigam os cientistas em todo o mundo. O dióxido de carbono (CO₂) é uma fonte ideal de carbono (C1) pois é inesgotável, renovável e prontamente disponível.¹ A produção de carbonatos cíclicos a partir da cicloadição do CO₂ com epóxido é uma rota 100% eficiente em átomos (Esquema 1). Em adição, os carbonatos cíclicos são aplicados como solvente polar aprótico e intermediários.² Entretanto, esta reação não ocorre em condições acessíveis, portanto, é essencial o desenvolvimento de novos catalisadores.³

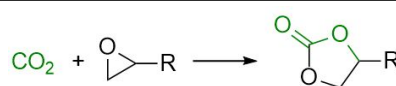
Neste trabalho, sintetizamos e caracterizamos (FT-IR, RMN ¹H e ¹³C, TGA, DTGA, MP) oito sais de bis-benzimidazólio protonados (Figura 1). As estruturas moleculares dos compostos 6, 7 e 8 foram confirmadas por difração de raio-X em monocristal. Posteriormente, investigamos a atividade catalítica dos sais na cicloadição de óxido de propileno e CO₂ na ausência de solvente e aditivos (Tabela 1). A influência na atividade catalítica de diferentes grupos no cátion e diferentes ânions foram explorados. As otimizações das condições reacionais tais como carga de catalisador, temperatura, pressão, solvente, tempo de reação foram consideradas. Por fim, esta nova metodologia foi estendida para outros epóxidos substratos e o mecanismo da reação foi elucidado através de experimentos acompanhados por ¹H RMN.

Em conclusão, sintetizamos uma nova série de sais de benzimidazólio protonados e aplicamos como catalisadores na cicloadição de CO₂ e epóxidos. Em condições ótimas, diversos epóxidos são eficientemente convertidos para o carbonato cíclico correspondente.

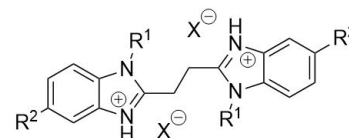
Agradecimentos: CNPq, FAPEG, CAPES, CAM/UFG, LabRMN/UFG.

Referências

1. Goodrich, Peter, et al. ACS Sustainable Chemistry & Engineering 5.7 (2017): 5635-5641.
2. Wang, Tengfei, et al. ACS Sustainable Chemistry & Engineering 6.2 (2017): 2574-2582.
3. Milani, Jorge Luiz Sônego, et al. Journal of CO₂ Utilization 30 (2019): 100-106.



Esquema 1. Síntese de carbonatos cíclicos .



- 1: R¹=R²=H, X=Br
- 2: R¹=Me, R²=H, X=Br
- 3: R¹=Et, R²=H, X=Br
- 4: R¹=Bu, R²=H, X=Br
- 5: R¹=H, R²=NO₂, X=Br
- 6: R¹=H, R²=Me, X=Br
- 7: R¹=H, R²=Me, X=Cl
- 8: R¹=H, R²=Me, X=I

Figura 1. Estrutura química dos sais de bis-benzimidazólio protonados.

Tabela 1. Cicloadição de CO₂ e óxido de propileno (PO).^a

Cat.	Conv. (%)	Selet. (%)
1	3	0
2	4	0
3	10	0
4	22	64
5	6	33
6	51	91
7	20	56
8	83	98

^a Condições: PO (25mmol), catalisador (1mmol%), 3h, 100°C, 30bar. ^b Conversões e seletividades são determinadas por ¹H RMN.

Síntese de compósitos entre grafeno amassado/óxido de cobre para aplicação em sensores eletroquímicos de glucose

*Ana W B N Silva¹(IC), Leticia M Alencar¹(PG) Victor H R Souza¹(PQ).
walkilaine12@gmail.com

¹ Universidade Federal da Grande Dourados (UFGD); Faculdade de Ciências Exatas e Tecnologia (FACET), Dourados, MS, Brasil.

Palavras-chave: Sensor, Glucose, Grafeno, Óxido de cobre

A glucose é um monossacárido de fórmula molecular $C_6H_{12}O_6$, a qual é fonte de energia para funções celulares. O descontrole dos níveis desta molécula no sangue pode levar a diabetes, doença que atinge milhares de pessoas e que pode acarretar em sérias complicações de saúde.¹ Devido a importância do monitoramento desta molécula, o número de estudos para desenvolvimento de métodos de detecção rápidos, com alta sensibilidade e reprodutibilidade, e menos invasivos tem sido exaustivos. Embora os métodos existentes baseados em enzimas apresentem boa resposta para a detecção de glucose, os mesmos demonstram desvantagem devido à baixa estabilidade, alto custo, e por serem facilmente comprometido por agentes externos, como temperatura, pH e umidade.² A produção de sensores pode ser realizada com diversos tipos de materiais, entre eles está o grafeno. Este material que possui inúmeras propriedades decorrentes de sua estrutura bidimensional composta por átomos de carbono com hibridização sp^2 , que o confere elevada condutividade eletrônica, ampla área superficial e alta resistência mecânica.³ Outro recurso capaz de aperfeiçoar os métodos de detecção de glucose, são os sensores eletroquímicos não enzimáticos baseados em óxidos metálicos que têm sido amplamente explorados.⁴ Neste trabalho desenvolvemos sensores não enzimáticos de glucose a partir dos compósitos envolvendo grafeno amassado (crumpled graphene - CG) e óxido de cobre sintetizados em uma única etapa usando um forno tubular horizontal, em um processo de spray pirólise. Diferentes proporções entre óxido de grafeno e precursor de cobre (CG/Cu) foram utilizados na síntese dos nanocompósitos. Os materiais obtidos foram caracterizados por técnicas de microscopia eletrônica de varredura e transmissão, além de técnicas eletroquímicas. A partir das técnicas de imagem verificou-se a morfologia característica do grafeno amassado, além da presença das nanopartículas de cobre recobrimo a superfície do nanomaterial carbonáceo. Uma maior quantidade de nanopartículas foi observada nos compósitos com maiores concentrações de precursor metálico. Os voltamogramas em meio básico apresentaram o perfil característico dos processos de oxirredução de cobre. Medidas cronoamperométricas preliminares foram realizadas e observou-se resposta para a detecção de glucose. Um estudo exaustivo para a detecção de glucose será realizado para todos os compósitos, com a finalidade de alcançar baixos limites de detecção e elevada seletividade para a detecção desse analito.

Agradecimentos

Ana. W.B.N. Silva agradece a UFGD e o CNPq pela bolsa de iniciação científica. Victor H.R. Souza agradece ao CNPq (423918/2018-4), o INCT em Nanomateriais de Carbono e as agências Fapemig, CAPES e CNPq pelo apoio financeiro.

Referências

1. Kim, J.; Campbell, A. S.; Wang, J., A review. *Talanta* **2018**, 177, 163-170
2. Usman, M.; Pan, L.; Farid, A.; Riaz, S.; Khan, A. S.; Peng, Z. Y.; Khan, M. A. *Journal of Electroanalytical Chemistry* **2019**, 848, 113342.
3. Allen, M. J., Tung, V. C., Kaner, R. B., *Chemical Reviews*, **2009** v. 110, p.132-145.
4. Jing Luo, Sisi Jiang, Hongyan Zhang, Jinqiang Jiang, Xiaoya Liu. *Analytica Chimica Acta*. **2012**, 709 47-53.

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE COMPLEXOS DE Cu(II) DERIVADOS DE LIGANTES OXAMATOS

Nathália A. Costa¹(IC), Lucas G. H. Kalinke²(PQ), Danielle C. C. Gomes¹(PQ)

e-mail: nathaliaalmeidact@gmail.

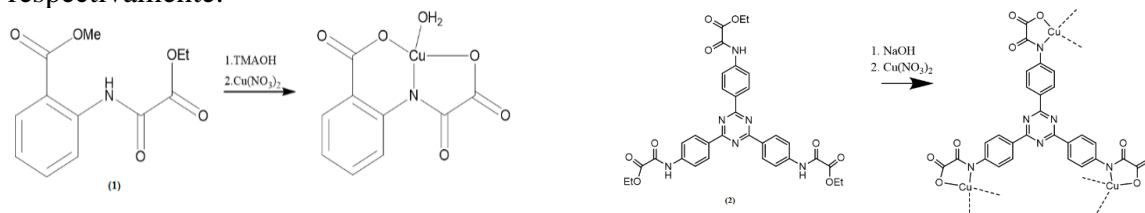
¹ Universidade Federal de Goiás

² Instituto Federal de Goiás

Palavras-chave: ligantes, oxamatos, cobre.

Os ligantes são compostos orgânicos espaçadores capazes de se coordenar a metais, que atuam na produção de complexos metálicos. [1] Os ligantes do tipo oxamato vem sendo usados na obtenção de polímeros heterobimetálicos, metaloligantes, que podem possuir variadas dimensionalidades e estruturas químicas levando a formação de redes com diferentes tipos de arquitetura.[2] Neste trabalho foi feita a síntese e caracterização de um novo ligante oxamato de formula HEtMe(ocpa) [ocpa=o-carboxi fenil oxamato] (**1**) H₃Et₃(topt) [topt = 1,3,5-Tris(4-feniloxamato)triazina] (**2**) e de seus respectivos complexos TMA[Cu(ocpa)(H₂O)] (**3**) e Na₆[Cu₃(topt)₂] (**4**).

Os ligantes HEtMe(ocpa) (**1**) H₃Et₃(topt) (**2**) foram preparados com rendimentos de 90% (**1**) e 76% (**2**).[3] Ambos foram caracterizadas por Ressonância Magnética Nuclear (RMN) e Espectroscopia no Infravermelho, o que comprovou a obtenção dos ligantes. Logo foram realizadas as síntese dos complexos TMA[Cu(ocpa)(H₂O)] e Na₆[Cu₃(topt)₂] de acordo com o esquema abaixo com rendimentos de 25% e 37% respectivamente.



O espectro de IV do composto (**3**) apresentou as principais bandas referentes νC-H do TMA em 2962-2875 cm⁻¹ e observou-se um deslocamento do νC=O em 1662-1590 cm⁻¹ quando comparado com o ligante livre. A análise do espectro de UV-vis apresentou a banda referente a transição d-d do Cu(II) em 485nm. Para o Na₆[Cu₃(topt)₂] as bandas no IV na região de 1504-1413 cm⁻¹ referentes ao νC-N do anel aromático, e νC=O em 1641-1620 cm⁻¹ foram observadas, e quando esses valores foram comparados com **2** foi possível notar o deslocamento das bandas. A análise do espectro de UV-vis para (**4**) apresentou a transição d-d do Cu(II) em 521 nm. Na análise térmica observou-se uma perda de massa associada a água do composto TMA[Cu(ocpa)(H₂O)] de 13,5 mg, que corresponde a 1,5 mol de H₂O e para Na₆[Cu₃(topt)₂] de 0,51 mg, que corresponde a 14 mol de H₂O na molécula.

Agradecimentos

UFG, CAPES, CNPQ.

Referências

[1] C. Janiak, *et al.*, Dalton. 2003, 14, 2781.

[2] J. Ferrando-Soroia, *et al.*, Coordination Chemistry Reviews 2017, 339, 17–103.

[3] Gomes Ruth; Bhanja Piyali; Bhaumik Assim. A Triazine-Based Covalent Organic Polymer For Efficient CO₂ Adsorption. Chem. Commun. 2015, 51.

Síntese e caracterização de complexos de Cu(II) com novos ligantes híbridos pirazol-imina

Guilherme F. Campos¹ (IC)*, Bárbara Tirloni² (PQ), Cristiane S. Schwalm¹ (PQ).
favacampos@gmail.com

¹Universidade Federal da Grande Dourados, Dourados-MS

²Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria-RS

Palavras-chave: pirazol, bases de Schiff, compostos de coordenação.

Derivados pirazólicos e bases de Schiff (iminas) são duas classes de compostos nitrogenados que tem em comum o fato de apresentarem atividades biológicas diversas e uma química de coordenação bastante explorada, o que lhes confere aplicações em áreas como química medicinal, bioinorgânica e catálise.¹ Complexos de Cu(II) e ligantes nitrogenados são amplamente reconhecidos por seu potencial citotóxico, especialmente através de mecanismos de clivagem de DNA.² Neste contexto, o presente trabalho teve como objetivo a síntese e caracterização de complexos de Cu(II) com dois ligantes híbridos pirazol-imina cuja síntese foi recentemente desenvolvida em nosso laboratório. Os complexos foram obtidos pela reação entre os ligantes (**L1** e **L2**) e quantidades estequiométricas de CuCl₂·2H₂O, em metanol, a temperatura ambiente (Figura 1).

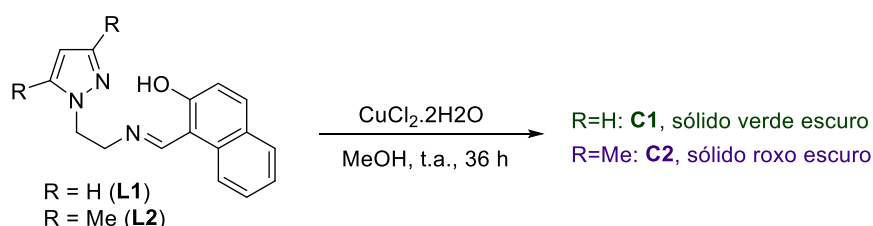


Figura 1. Preparação dos complexos de Cu(II) **C1** e **C2**.

Os complexos obtidos foram caracterizados por espectroscopia vibracional de absorção na região do infravermelho e termogravimetria-calorimetria exploratória diferencial simultânea. Além disso, as estruturas cristalinas foram determinadas por difratometria de raios X em monocristal, através da qual pode-se verificar a formação de complexos do tipo CuLCl, nos quais os híbridos pirazol-imina atuam como ligantes tridentados monoaniônicos.

Agradecimentos

UFGD, CAPES, CNPq e FINEP.

Referências

1. a) Faria, J. V., Vegi, P. F.; Migueta, A. G. C., Santos, M. S., Boechat, N.; Bernardino, A. M. R. *Bioorg. Med. Chem.* **2017**, 25, 5891. b) Abu-Dief, A. M., Mohamed, I. M. A. *Beni-Seuf Univ. J. Appl. Sci.* **2015**, 4, 119. c) Ojwach, S. O., Darkwa, J. *Inorg. Chim. Acta* **2010**, 363, 1947. d) Mukherjee, R. *Coord. Chem. Rev.* **2000**, 203, 151.
- 2) Gama, S., Mendes, F., Marques, F., Santos, I. C., Carvalho, M. C., Correia, I., Pessoa, J. C., Santos, I., Paulo, A. *J. Inorg. Biochem.* **2011**, 105, 637.

Síntese e caracterização de HDLs baseado em α -Ni(OH)₂ como material promissor de eletrodo para sistemas de armazenamento de energia

Isabella Fonseca^{1*} (PG), Cristiane G. Silva (PG)¹, Paulo R. Martins¹ (PQ)
isabellafnsc@gmail.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, GO, Brasil

Palavras-chave: hidróxido duplo lamelar, armazenamento de energia, eletroquímica

A demanda energética tem se intensificado como consequência do crescimento populacional e do desenvolvimento social nos âmbitos tanto tecnológicos quanto econômicos. Devido ao esgotamento das fontes de energia não renováveis é necessário a busca por novos materiais que sejam capazes de armazenar adequadamente a energia produzida por fontes de energia alternativas. Neste sentido, o Ni(OH)₂ tem ganhado destaque devido as suas excelentes propriedades catalíticas, magnéticas e eletroquímicas. O Ni(OH)₂ pertence a uma categoria de materiais inorgânicos classificados como sólidos lamelares. Apesar de ser um composto muito estudado e aplicado, o mesmo possui limitações como a rápida conversão entre suas fases polimórficas (alfa e beta), o que pode afetar a sua atividade eletroquímica. Para estabilizar a fase polimórfica alfa que possui comportamento eletroquímico superior, os íons de Ni²⁺ foram substituídos por íons de Al³⁺ na proporção de 90:10 e 75:25 respectivamente para Ni e Al na matriz de Ni(OH)₂. O Ni(OH)₂ e os HDLs de Ni e Al foram obtidos através do método de Tower modificado¹. Tanto o Ni(OH)₂ quanto os HDLs foram caracterizados por difração de raios X (DRX), espectroscopia fotoeletrônica de raios X (XPS) e microscopia eletrônica de transmissão (MET). Através do DRX foi evidenciado que os materiais apresentaram características amorfas, devido à baixa intensidade de seus picos de difração, bem como um certo alargamento dos mesmos. A fase polimórfica dos materiais pode ser determinada através da posição do pico de difração 003. Como este pico de difração foi encontrado em regiões de baixo ângulo 2 θ , sendo de 7,91° para o Ni(OH)₂, 8,71° para o NiAl-HDL-90:10 e 9,24° para o NiAl-HDL-75:25, podemos concluir que estes materiais se encontram na fase polimórfica alfa. Através da técnica de XPS foi possível inferir que os íons metálicos presentes nos HDLs encontram-se nos estados de oxidação +2 e +3, respectivamente para Ni e Al. Através da técnica de MET foi possível observar que os materiais apresentam dimensões nanométricas com uma distribuição de 5 – 10 nm. Para as caracterizações eletroquímicas, foi possível obter a velocidade de rotação mais adequada para obtenção dos filmes, além da velocidade de varredura evidenciando que o material é do tipo bateria. Dentro dos estudos voltamétricos, o material que apresenta melhor comportamento eletroquímico foi definido. Outras análises ainda serão realizadas para avaliar os efeitos da substituição dos íons de Ni²⁺ e Al³⁺, como a carga e descarga galvanostática e a espectroscopia de impedância eletroquímica.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, IQ/UFG e LaCEnPA.

Referências

1. ROCHA, M. A. et al. A New Insight on the Preparation of Stabilized Alpha-Nickel Hydroxide Nanoparticle. Journal of Nanoscience and Nanotechnology, 11, 2011, 3985.

Síntese e caracterização de novos compostos de coordenação de Cu^{II} a partir de um ligante do tipo oxamato

Raíssa R. e Silva¹ (IC), Jhonny W. Maciel³ (PG), Danielle C. Gomes² (PQ)
raissaufg@gmail.com

^{1,2,3} Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, UFG-GO, CEP 74690-900 Goiânia-Goiás

Palavras-chave: cobre, oxamato, bpca, amina de terminação

A síntese de novos compostos de coordenação dinucleares com ligantes do tipo oxamato resultam da característica bis-bidentada deste tipo de ligante.^[1] Os compostos possuem propriedades magnéticas e catalíticas que podem ser exploradas. Neste trabalho, o ligante do tipo oxamato ácido N-(4-carboxifenil) oxâmico etil éster (EtH₂pcpa) foi utilizado na sua forma de sal para atuar como ponte de precursores metálicos de cobre(II) e formar complexos dinucleares inéditos.

O composto **1** de fórmula [Cu₂(bpca)₂(pcpa)(NO₃)]·xH₂O foi obtido a partir de uma reação por difusão lenta em um tubo H em que, de um lado foi adicionado em solução aquosa o complexo [Cu(bpca)]⁺^[2] (onde bpca = bis(2-piridilcarbonil)-amideto) e no lado oposto do tubo, o Na₂Hpcpa em solução aquosa, ambos os lados com concentração equimolar de 0,1 mmol. Após seis dias sob temperatura menor que 20°C, formou-se cristais azuis. O composto **2** de fórmula [Cu₂(pmdeta)₂(pcpa)(NO₃)₂]·xH₂O foi obtido através da evaporação lenta à temperatura ambiente de uma solução aquosa contendo Cu(NO₃)₂·3H₂O, N,N,N',N'',N''' pentametildietilenotriamina (pmdeta) e Na₂Hpcpa na concentração 0,1 mmol cada. Após a evaporação parcial foram obtidos pequenos cristais azuis, que foram lavados com metanol. Os rendimentos para os compostos foram de 69% (**1**) e 44% (**2**). A caracterização dos compostos foi feita por espectroscopia no infravermelho onde os resultados estão tabelados abaixo e espectroscopia na região do UV-vis com bandas largas centradas em 673 nm, referente a transição d-d do Cu (II).

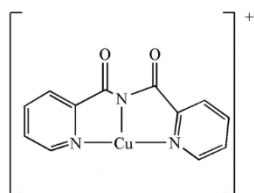


Figura 1. Complexo [Cu(bpca)]⁺

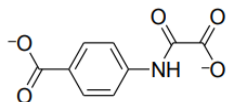


Figura 2. Ligante pcpa

Tabela 1. Principais atribuições do ligante tipo oxamato e precursores.

Atribuição (cm ⁻¹)	1	2
NO ₃ ⁻	1363	1384
v(C=O) _{amida}	1647	1647
v(C=O) _{COOH}	1718	1690
v(C=O) _{imida}	1717	-
v(C-H) _{arom}	3090	3077
v(C-H) _{alif}	-	2929
v(N-H) _{amina}	3414	-
v(O-H) _{H₂O}	3437	3435

Referências

- MACIEL, J. W. New Metal-Organic Systems with a Functionalized Oxamate-Type Ligand and Mn^{II}, Fe^{II}, Cu^{II} and Zn^{II}. J. Braz. Chem. Soc., Vol. 30, No. 11, p. 2414 (2019).
- CASTRO, Isabel. Copper(II)-assisted Hydrolysis of 2,4,6-Tris(pyridyl)-1,3,5-triazine. Part 3. Crystal Structures of Diaqua[bis(2-pyridylcarbonyl)amido]copper(II) Nitrate Dihydrate and Aqua[bis(2-pyridylcarbonyl)amido]copper(II) Nitrate Monohydrate. p. 892 – 895. J. Chem. Dalton Trans (1990).

Síntese e Caracterização de um novo Polímero de Coordenação de Cobre(II) com ligante triazólico

Bruna A. Rodrigues¹ (IC), Olívia B. O. Moreira²(PG), Karyne C. de Souza¹(PQ), Jackson A. L. C. Resende¹(PQ).

¹Instituto de Ciências Exatas e da Terra, Campus Universitário do Araguaia, Universidade Federal do Mato Grosso, Barra do Garças, Brasil.

²Departamento de Química, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, Brasil.

Palavras-chave: coordination complex, Triazole, Single-crystal X-ray diffraction

Triazóis são uma classe de compostos heterocíclicos nitrogenados sintéticos de cinco membros que apresenta um vasto campo de aplicações, que vão desde usos como explosivos, agroquímicos e farmacológico, devido sua atividade antifúngica, antiviral e anticancerígena.^[1]

O composto foi produzido através da reação do ligante ácido de partida com perclorato de cobre hexahidratado, na proporção de 1:1, em metanol. Foram adicionadas algumas gotas de trietilamina. A solução límpida permaneceu em repouso por 72hrs até a obtenção do monocristais de coloração azulada. O composto foi caracterizado por DRX e FTIR.

A análise estrutural possibilitou descrever que a unidade assimétrica do cristal é formada por dois átomos de cobre independentes, localizados sobre centros de inversões da célula unitária. Além destes dois átomos de cobre, observa-se também duas moléculas do ácido independentes na unidade assimétrica.

A coordenação dos átomos de cobre ao ligante leva a formação de um polímero de coordenação unidimensional na direção [110]. Os grupamentos amins são muito relevantes para o empacotamento cristalino do composto, pois realizam importantes ligações de hidrogênio. Tais interações expandem as características supramoleculares do sistema para planos bidimensionais, resultando em um sistema supramolecular com características lamelares.

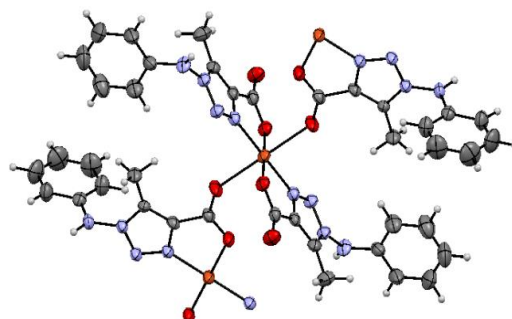


Figura 1: Representação da estrutura cristalina

Agradecimentos
UFMT e CNPq

Referências

1. Melo, J. O. F. *et al.*. *Química Nova*, 2006, v. 29, p. 569-579.

Síntese e caracterização espectroscópica do complexo de Cu(II) derivado de um ligante oxamato

Maria Clara O. E. Souza¹ (IC), Pedro V. V. Romanholo¹ (PG), Lucas H. G. Kalinke² (PQ), Ana K. Valdo¹ (PQ), Felipe T. Martins¹ (PQ), Lívia F. Sgobbi¹ (PQ), Danielle C. C. Gomes¹ (PQ).

mclara_orioli@hotmail.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás UFG-GO, CEP 74690-900 Goiânia-Goiás,

²Instituto Federal de Goiás - IFG - Campus Anápolis, CEP: 75131-457. Anápolis-GO

Palavras-chave: oxamato, cobre, metaloligante

Os ligantes do tipo oxamato são usados para promover interações metal e ligante formando metaloligantes precursores de polímeros de coordenação, possibilitando diversos modos de interação entre diferentes metais [1]. A interação metal-ligante é responsável por gerar estruturas características da química metalosupramolecular. Os polímeros de coordenação deste tipo são estáveis e apresentam uma diversidade de topologias estruturais. A escolha do metal utilizado está relacionada às propriedades físicas que a classe de compostos pode apresentar [2]. O ligante oxamato denominado Et₂H₂acriba [onde acriba = (N,N' - 3,6-diaminoacridina-bis(oxamato))] foi sintetizado a partir da 3,6-diaminoacridina e obtido com 92,8% de rendimento. Na segunda etapa o complexo inédito foi sintetizado a partir da hidrólise do ligante em meio básico. O metaloligante de Cu(II) tem a fórmula proposta Na₄[Cu₂(acriba)₂].14H₂O e foi preparado com a estequiometria 1:1 (L:M), obtendo rendimento de 54,3%. A caracterização do ligante oxamato foi feita por ressonância magnética nuclear de hidrogênio (RMN) e espectroscopia na região do infravermelho (Tabela 1), observando que praticamente toda a amina inicial foi convertida ao ligante (fig. 1). A formação do precursor foi comprovada a partir da caracterização por análise termogravimétrica, espectroscopia na região do infravermelho (Tabela 1) e espectroscopia da região do UV-vis nos estados líquido e sólido, apresentando uma banda em 560 nm característica da transição dx_z, dy_z → dx²-y² de um composto quadrado planar.

Tabela 1. Principais atribuições do ligante oxamato e do metaloligante

Na₄[Cu₂(acriba)₂].14H₂O.

Atribuição (cm ⁻¹)	Et ₂ H ₂ acriba	Na ₄ [Cu ₂ (acriba) ₂].14H ₂ O
νC=C	1622	1452
νC=O	1730	1642
νN-H	3331	-

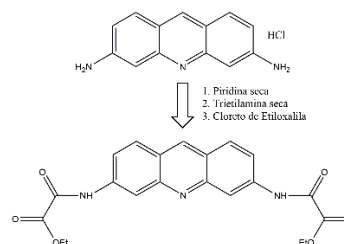


Figura 1. Conversão da amina 3,6-diaminoacridina em ligante oxamato.

As análises feitas até o momento indicam a formação dos compostos esperados. Como perspectivas serão feitos testes de cristalização e caracterizações por meio de análise elementar e análises eletroanalíticas.

Agradecimentos: CAPES, CNPQ, FAPEG, e UFG.

Referências

- (1) J. Ferrando-Soroia, *et al.*, Coordination Chemistry Reviews 2017, 339, 17–103.
- (2) Shriver, D. F., Química Inorgânica. 4^o edição ed.; Bookman: Porto Alegre, 2008

Síntese e caracterização estrutural da cadeia [Cu(bpca)](PF₆)

Wébia F. da Cruz¹ (IC), Ana K. Valdo² (PG), Felipe T. Martins² (PQ), Danielle Cangussu² (PQ), Lucas H. G. Kalinke¹ (PQ). *webia.ferreira@hotmail.com*

¹Instituto Federal de Goiás, IFG – Campus Anápolis, Anápolis – GO – Brasil.

²Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás – UFG, Goiânia – GO – Brasil.

Palavras-chave: polímeros de coordenação, complexo, monocristal

Polímeros de coordenação são estruturas supramoleculares obtidas através da interação de ligantes orgânicos com íons metálicos. Esses polímeros encontram diversas aplicações como na área do magnetismo molecular, armazenamento de gases, catálise etc^{1,2}. Inicialmente o composto [Cu(bpca)(H₂O)₂](NO₃).2H₂O (**1**) (bpca= bis(2-piridilcarbonil)amidato) foi sintetizado pela hidrólise do tptz (2,4,6-tris(2-piridil)-s-triazina) pelo íons Cu(II) em meio aquoso. O composto [Cu(bpca)](PF₆) (**2**) foi obtido pela troca iônica usando o composto **1** e excesso do sal de NaPF₆ em meio aquoso. Os compostos **1** e **2** foram caracterizados por espectroscopia na região do infravermelho (IV) e o composto **2** por difração de raios X de monocristal. No espectro de IV do composto do composto **2** são observadas o as bandas do ligante bpca (1716 cm⁻¹ (C=O), 1637 cm⁻¹ (C=N) e 1603 cm⁻¹ (C=C)) entretanto a ausência da banda referente ao íon NO₃⁻ (1384 cm⁻¹) e a presença das bandas em 831 e 760 cm⁻¹ referentes ao íon PF₆⁻, confirmam a troca dos contra íons. Monocristais na forma de agulhas azuis do composto **2** foram obtidos por evaporação lenta. O composto **2** cristalizou no grupo espacial P4₂/n e consiste em uma polímero 1D (cadeia) construída a partir de unidades [Cu(bpca)]⁺ e os contra-íons de PF₆⁻. O íon Cu(II) se encontra pentacoordenado em uma geometria bipirâmide trigonal distorcida (Figura 1). O polímero 1D consiste na coordenação das carbonilas de uma unidade [Cu(bpca)]⁺ ao íon Cu(II) de outra unidade sucessivamente paralelamente ao eixo c.

Neste trabalho foi sintetizado um polímero de coordenação unidimensional [Cu(bpca)](PF₆) a partir do monômero [Cu(bpca)(H₂O)₂]⁺ na presença de íons PF₆⁻. Como perspectivas estão o estudo das propriedades magnéticas do polímero e a potencial aplicação na obtenção outros de sistemas moleculares.

Agradecimentos

IFG, UFG, CNPq, CAPES.

Referências

- Zhang, W.-X. X., Liao, P.-Q. Q., Lin, R.-B. B., Wei, Y.-S. S., Zeng, M.-H. H., & Chen, X.-M. M. *Coordination Chemistry Reviews*, 2015, 293–294, 263.
- Li, N., Feng, R., Zhu, J., Chang, Z., & Bu, X. H. *Coordination Chemistry Reviews*, 2018, 375, 558.

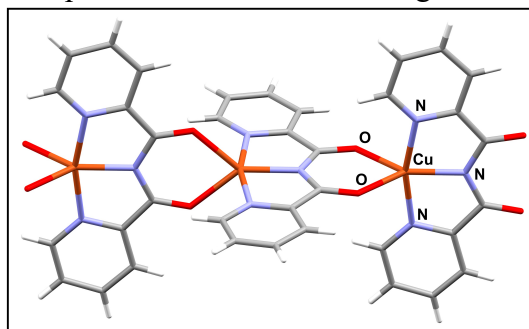


Figura 1- Representação da cadeia do composto **2** (os íons PF₆⁻ foram omitidos para melhor visualização)

Síntese e caracterização estrutural de complexos de Cu(II) com o ligante glutaraldeído bis(isonicotinilhidrazona)

Guilherme P. Soares¹ (IC), Aurillo F. D. Colman¹ (IC), Cristiane S. Schwalm¹ (PQ), Bárbara Tirloni² (PQ) e Eliandro Faoro¹ (PQ).

guiwsjh8@gmail.com

¹Universidade Federal da Grande Dourados, Dourados-MS

²Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria-RS

Palavras-chave: bases de Schiff, compostos de coordenação, difratometria de raios X.

Atualmente, dentro da química de coordenação, destacam-se pesquisas voltadas a complexação de ligantes do tipo bases de Schiff, visto que complexos metálicos de bases de Schiff apresentam diversas propriedades interessantes, como atividade antitumoral e antimicrobiana^{1,2}. Visando explorar essa área, o presente trabalho apresenta a síntese e caracterização de dois novos complexos de cobre(II), contendo o ligante glutaraldeído bis(isonicotinilhidrazona), H₂L. A metodologia desenvolvida no presente trabalho consiste em duas etapas: a primeira etapa envolve a desprotonação dos ligantes, utilizando bicarbonato de sódio como base e metanol como solvente. Posteriormente, adiciona-se o sal metálico (CuCl₂·2H₂O). Esses complexos foram caracterizados por espectroscopia vibracional de absorção na região do infravermelho, termogravimetria-calorimetria exploratória diferencial simultânea e tiveram as suas estruturas cristalinas determinadas por difratometria de raios X, onde ficaram elucidadas as estruturas como: (CuL)₂ (**1**) e (CuL)₂·2H₂O (**2**), conforme visualizado na Figura 1.

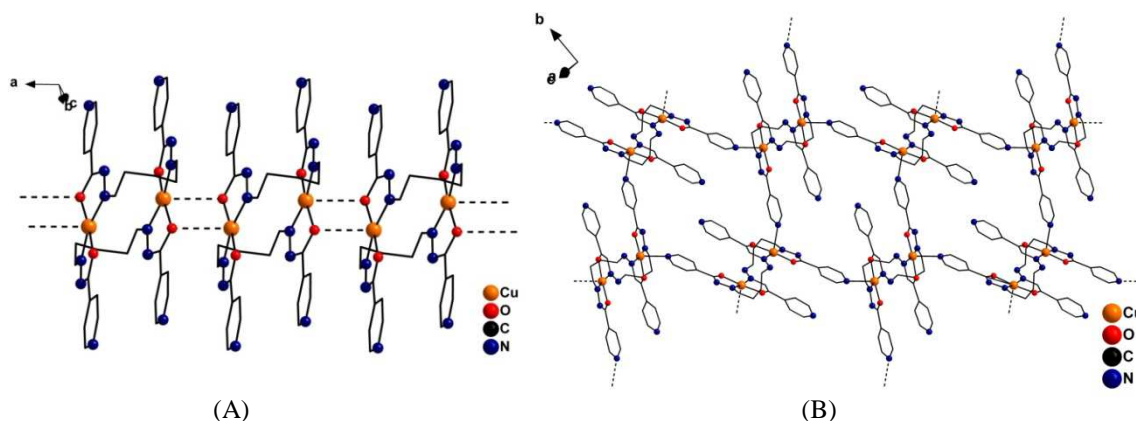


Figura 1. Estruturas poliméricas dos compostos **1** (A) e **2** (B). Para fins de clareza, os átomos hidrogenoides e as moléculas de solvato foram omitidos.

Agradecimentos

UFGD, Fundect, CNPq e FINEP.

Referências

- Hickey, J.L.; Crouch, P.J.; Mey, S.; Caragounis, A.; White, J.M.; Whiteb, A.R.; Donnelly, P.S. Dalton Transactions, 2011, 40, 1338.
- Taha, R.H.; El-Sharief, Z.; Salman, A.A.; El-Fakharany, E.M.; Mansur, M.M. Journal of Molecular Structure, 2019, 1181, 536.

Síntese, caracterização e comportamento eletroquímico do α -Co(OH)₂

Cristiane G. Silva^{1*} (PG), Isabella Fonseca¹ (PG), Paulo R. Martins¹ (PQ)

E-mail: cristiane.g.s17@gmail.com

¹ Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, GO.

Palavras-chave: materiais eletroativos, dispositivos supercapacitores, hidróxido de cobalto.

A elevação nos níveis de consumo e o declive das fontes de combustíveis fósseis têm estimulado à procura por materiais eletroativos¹. Os hidróxidos metálicos de transição são atraentes como materiais de eletrodo em Dispositivos Supercapacitores, podendo estes serem encontrados nas fases α e β . Devido à estrutura amorfa e com grande espaçamento interlamelar a fase α apresenta um comportamento eletroquímico superior à fase β ². Nessa perspectiva, o desenvolvimento de eletrodos positivos a partir de α -Co(OH)₂ se mostra promissor. Para tal, o Co(OH)₂ foi sintetizado conforme o método Tower³. A curva termogravimétrica do material apresentou processos de perda de massa na região de ~ 100 °C atribuída à eliminação de H₂O, entre 150 e 270 °C a perda é consequência da saída de compostos orgânicos, entre 270 e 300 °C advém do processo de desidratação e formação de CoO e a partir de ~ 300 °C é atribuída a degradação da estrutura lamelar. O DRX do Co(OH)₂ apresentou pico em 10,50° (2 θ), cuja distância basal foi de 8,42 Å, correspondente ao plano cristalográfico (003), indicativo do polimorfo tipo α . O tamanho médio do grão estimado foi de 7,36 nm, sendo o resultado condizente com as imagens de MET, cujo tamanho das nanopartículas foi de 5 - 20 nm. O espectro XPS de alta resolução na região Co 2p evidenciou a presença de duas bandas principais sendo Co 2p_{1/2} (796,32 eV) e Co 2p_{3/2} (780,50 eV) e duas bandas satélites em 801,78 eV e 784,45 eV, indicativas da existência de íons Co²⁺. Para medidas eletroquímicas o α -Co(OH)₂ foi depositado sobre o eletrodo de FTO e seu comportamento avaliado por Voltametria cíclica, utilizando um sistema convencional de três eletrodos, à 50 mV/s e eletrólito suporte de KOH_(aq) 1 mol/L. O 1000° ciclo voltamétrico apresentou E_{pa} em 0,14 V e E_{pc} em 0,08 V, relacionado ao processo redox Co^{II/III}. Ao longo dos 1000 ciclos o deslocamento do E_{pa} para regiões de potenciais mais positivas não foi relevante. Além disso, não houve diminuição acentuada das i_{pa}. Os voltamogramas demonstram um comportamento capacitivo, cuja assinatura eletroquímica é de pseudocapacitância de intercalação extrínseca⁴, sendo esta análise condizente com o valor de b (1,13) obtido no estudo das velocidades de varredura. Medidas de carga e descarga galvanostática (CDG) foram realizadas em diferentes densidades de corrente, cujo tempo em 0,5 e 15 A g⁻¹ foi respectivamente 298,25 e 6,28 segundos, correspondendo à capacitância específica de 268,70 e 188,40 F g⁻¹. Ao longo de 5000 ciclos de CDG aplicando 7 A g⁻¹ o material apresentou 163,38 F g⁻¹ e retenção de 82,65%, o que demonstra excelente estabilidade do material analisado.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, IQ/UFG e LaCENPA.

Referências

1. Zhu, Y. *et al.* Journal of Power Sources, 2019, 412, 559-567.
2. Cheng, J. P. *et al.* Journal of Colloid and Interface Science, 2017, 486, 344-350.
3. Rocha, M. A. *et al.* Journal of Nanoscience and Nanotechnology, 2011, 11, 3985-3996.
4. Augustyn, V. Simon, P. Dunn, B. Energy & Environmental Science, 2014, 7, 1597-1614

Síntese, caracterização e propriedades multifuncionais do nanocompósito $\text{CoFe}_2\text{O}_4@ \text{SiO}_2$

Yara S. Gomes¹ (IC), Thiago Eduardo P. Alves¹ (PQ), Thatielly F. De Almeida (IC).
yarasoaresss28@gmail.com

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás – IFG, Campus Anápolis.

Palavras-chave: $\text{CoFe}_2\text{O}_4@ \text{SiO}_2$, magnetismo, óptica.

As nanopartículas magnéticas (NPM) revestidas com sílica tem sido alvo de grandes discussões em diferentes campos do conhecimento, e também intensivas investigações devido seu potencial de aplicação em diversas áreas, dentre eles a biomedicina¹.

Entre os óxidos de ferro estudados, o interesse na ferrita de cobalto (CoFe_2O_4) se deu devido às suas propriedades físicas e químicas, tais como, boa estabilidade mecânica e química, comportamento eletricamente isolante, propriedades ferromagnéticas com alta temperatura, etc². A sílica por sua vez é um revestimento inorgânico com características favoráveis às aplicações biomédicas³, favorece a dispersão das partículas em meio líquido, deixa as partículas mais estáveis em relação a toxicidade, e apresenta grupos silanóis que podem se ligar covalentemente com ligantes específicos, dependendo do interesse da pesquisa.

No presente trabalho houve a sintetização e caracterização da ferrita de cobalto (CoFe_2O_4) por meio da co-precipitação, e o revestimento da partícula CoFe_2O_4 com sílica foi realizado através do método Stober com tetraetilortossilicato (TEOS) em meio básico. Os nanocompósitos foram caracterizados por difração de raios x (DRX), espectroscopia na região do infravermelho e então foram estudadas as curvas de histerese magnética. A próxima etapa trata-se da incorporação dos ligantes fenantrolina e de metais terra-rara (Eu^{3+} e Ho^{3+}) para estudo das propriedades ópticas.

Agradecimentos:

Ao IFG- Câmpus Anápolis, pelo espaço concedido aos estudos e pesquisas, e à UEG e UFG pela parceria na caracterização.

Referências

1. BERRY, C.C.; CURTIS, A.S.G. Functionalisation of magnetic nanoparticles for applications in biomedicine. *Journal of Physics D: Applied Physics*, v. 36, p.198-206, 2003.
2. ALVES, T. E. S. **Síntese, caracterização e estudo das propriedades magnéticas e ópticas de óxidos nanoparticulados: $\text{CoFe}_{2-x}\text{Y}_x\text{O}_4$ produzido por reação de combustão e ZnO produzido por meio do método poliol.** Dissertação de doutorado. UFG, Goiania, 2018.
3. FIGUEROLA, A.; DI CORATO, R.; MANNA, L.; PELLEGRINO, T. **From iron oxide nanoparticles towards advanced iron-based inorganic materials designed for biomedical applications.** *Pharmacol. Res.*, 62 p. 126–143, 2010

Análise da composição da resina de *Mangifera indica* L. (Mangueira) e *Croton urucurana* (Sangra D'água) e Atividade Biológica das mesmas.

Ailton C. C. Nascimento¹ (IC), Marília Lamparelli¹ (IC), Rosângela M. Rodrigues² (PQ), Ricardo A. F. Matos¹ (PQ).

ailton.c.nascimento@outlook.com

¹Curso de Química, UAECIEXA, Universidade Federal de Jataí, ²Curso de Biomedicina, UAECISAU, Universidade Federal de Jataí

Palavras-chave: *Mangifera indica* L., *Croton urucurana*, resina, atividade biológica.

A **mangueira** (*Mangifera indica* L.) é uma árvore frutífera nativa do sul/sudeste asiático, introduzida com sucesso no Brasil. Há estudos sobre a aplicação da resina no tratamento antibacteriano, resfriados, tosse, diarreia e reumatismo. A *Croton urucurana*, ou **sangra d'água**, árvore de porte pequeno abundante no Brasil, possui propriedades anti-infecciosas, cicatrização, antibactericidas, antivirais e antioxidantes. Este trabalho visa extração, isolamento e caracterização química dos constituintes da resina bruta da mangueira e da sangra d'água, analisando suas atividades biológicas.

As resinas foram coletadas em árvores localizadas no Campus da UFJ, pelo método da sangria do caule e do fruto, além de amostras da resina cristalizada no caule (mangueira). A resina da sangra d'água foi coletada apenas do caule.

Inicialmente, identificaram-se as classes de constituintes das resinas¹. Para a mangueira identificou-se a presença de taninos condensados e triterpenos. No extrato da sangra d'água identificou-se alcalóides, saponinas e taninos condensados. Em sequência, iniciou-se a separação dos constituintes do extrato bruto^{2,3}. Estudos sobre a atividade biológica do extrato bruto foram feitos, observando-se ótima resposta do extrato bruto da sangra d'água na imobilização das larvas filarióides de *Strongyloides venezuelensis*. Os mesmos resultados não foram tão promissores com o extrato bruto da mangueira, porém testes com outros agentes infecciosos serão feitos.

A segunda etapa consistiu na separação e caracterização das frações dos extratos e utilizar os mesmos para testes de atividade biológica.

Agradecimentos

Universidade Federal de Jataí

Referências

1. Radi, P. A.; Hernandez-Terrones, M. G. Revista Horizonte Científico, v. 2, p. 5, 2005.
2. Queiroz, G.S. *Relatório de Estágio Supervisionado II*, UFSC, 2009.
3. Matos, F.J.A. *Introdução à Fitoquímica Experimental*. Edições UFC. Fortaleza, 1988.

Aplicação da extração em fase sólida utilizando polímeros de impressão molecular na quantificação de furanocumarinas do extrato etanólico de mama-cadela (*Brosimum gaudichaudii*)

Maria Eduarda R. dos Santos¹(IC), Natália Figueiredo Vieira¹(IC), Karla S. Malaquias²(PQ)
maria.eduarda.duda1212@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Bacharelado em Química.

²Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Programa de Pós-Graduação em Química.

Palavras-chave: Mama-cadela, furanocumarinas, polímeros de impressão molecular e extração em fase sólida.

Os compostos furocumarinos psoraleno e bergapteno são os fotossensibilizantes mais comuns no tratamento de leucodermias como: acromias, vitiligo e outras doenças da pele¹. O extrato da raiz de *Brosimum gaudichaudii*, planta vulgarmente conhecida como mama-cadela e encontrada no Cerrado Brasileiro, é utilizado no fitoterápico Viticromin[®] para o tratamento de vitiligo. O uso do extrato vegetal no lugar das moléculas bioativas é vantajoso, pois a rota sintética das furocumarinos é onerosa². Desta forma, a busca por técnicas que permitam a extração e/ou concentração de analitos em matrizes complexas são necessárias. Neste contexto, a extração em fase sólida (EFS) utilizando polímeros de impressão molecular (PIM) para a quantificação de furanocumarinas do extrato etanólico de mama-cadela foi o foco do presente trabalho. A extração foi realizada a partir de 1g do córtex da raiz macerada com etanol absoluto na proporção de 1:20 (m/v). O extrato foi deixado em repouso por 8 dias em frasco âmbar. Os PIM's foram preparados por meio da reação de 1 g de sílica, 200 mL de metanol, 300 mL de água deionizada e 20 mL de NH₄OH (25%). Nesta solução foram adicionados 2,0 mL de 3-Aminopropil-trietoxissilano e 15,0 mL de tetraetilortossilicato. Foram preparadas 2 variações: **(a) PIM 1** – com 1g do extrato etanólico como *template*; **(b) PIM 2** – com 10mL de uma solução (1mg/mL) do padrão analítico psoraleno como *template*. A mistura resultante foi mantida em agitação por 24h, lavada com aparato de soxhlet por 20 horas com acetona e seco em estufa. Os polímeros sintetizados foram utilizados em cartuchos de EFS de amostras fortificadas com a solução padrão de psoraleno e posteriormente, em amostras reais do extrato etanólico de *Brosimum gaudichaudii*. A quantificação dos compostos foi acompanhada por cromatografia gasosa aliada a espectrometria de massas (CG-EM) no modo de íon monitorado: psoraleno (*m/z*: 186 e 158) e bergapteno (*m/z*: 216 e 173). A curva de calibração foi preparada com as seguintes concentrações (mg/mL): 1, 5, 10, 20 e 30; resultando na equação de reta $y = 87.19x + 765,0$ e nos seguintes parâmetros: coeficiente de determinação (R^2) 0,984; Limite de detecção de $\leq 0,78$ mg/mL; Limite de quantificação $\leq 2,3$ mg/mL; recuperação 81%. Os PIM's sintetizados apresentaram seletividade para a EFS das furanocumarinas analisadas. Contudo, o PIM 2 apresentou uma maior seletividade. As concentrações de psoraleno e bergapteno no extrato etanólico do córtex da raiz encontrados foram respectivamente de: **PIM 1** - 0,5% e 0,9% e **PIM 2** - 1,4% e 1,9%. Os estudos de otimização das variáveis estão em andamento a fim de, atingir melhores resultados de extração.

Referências

1. Koul, B., Taak, P., Kumar, A., Kumar A., Sanyal, I. Journal of Ethnopharmacology, 2019, 232, 201.
2. Jain, N., Sharma, K. P., Banik, A., Bhardwaj, V. Pharmacognosy Journal, 2011, 3, 11.

Avaliação da atividade antibacteriana da alface silvestre *Lactuca canadensis*

Carla T. P. Coelho¹ (IC), Rossana V. C. Cardoso² (PG), Ângela Fernandes² (PQ), Tania Pires², Lillian Barros² (PQ), Vanessa G. P. Severino¹ (PQ)
carlathaispc19@gmail.com

¹ Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, Brasil. ² Instituto Politécnico de Bragança, Centro de Investigação da Montanha, Bragança, Portugal.

Palavras-chave: plantas alimentares não convencionais, caracterização química.

O gênero *Lactuca* tem sido utilizado na dieta e medicina de forma tradicional a anos. O látex da *L. virosa* é conhecido como medicinal e utilizado na Europa pelas suas ações analgésica, antitússica e sedativa^[1]. Além disso, *Lactuca indica* L. e *Lactuca tatarica* (L.) C. A. Mey., tem sido tradicionalmente utilizadas no tratamento de distúrbios intestinais por suas atividades anti-inflamatória e antibacteriana^[2,3]. Recentemente, uma espécie do gênero, *L. canadensis*, foi identificada na América do Sul^[4], a qual é comumente chamada de almeirão roxo. Contudo, são escassos os estudos científicos sobre esta planta, e nesse sentido, este trabalho visou à determinação do seu potencial antibacteriano.

A atividade antimicrobiana dos extratos hidroetanólico e da infusão foi determinada seguindo o método de microdiluição descrito pelos autores Pires et al., 2018^[5]. Os microrganismos testados incluíram bactérias Gram-positivas (*Enterococcus faecalis*, *Listeria monocytogenes* e *Staphylococcus aureus* resistentes à meticilina) e bactérias Gram-negativas (*Escherichia coli*, *Klebsiella pneumoniae*, *Morganella morganii*, *Proteus mirabilis* e *Pseudomonas aeruginosa*). Ampicilina e Imipenem foram usados como controles negativos para bactérias Gram-negativas, enquanto Vancomicina e Ampicilina para bactérias Gram-positivas.

A infusão e o extrato evidenciaram uma concentração inibitória mínima (MIC) inferior ao controle para as bactérias gram-negativas *K. pneumoniae* (5 mg/mL), *M. morganii* (2,5 mg/mL) e *P. aeruginosa* (20 mg/mL). Quanto à concentração bactericida mínima (MBC), os valores foram superiores aos controles para todas as estirpes.

Este estudo preliminar forneceu resultados positivos da ação antibacteriana desta espécie pouco estudada, sugerindo possíveis aplicações da mesma nesse propósito.

Agradecimentos

Universidade Federal de Goiás; Instituto Politécnico de Bragança; Centro de Investigação da Montanha pela oportunidade de estágio à aluna Carla T. P. Coelho; Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT, Portugal); FEDER no âmbito do programa PT2020 pelo apoio financeiro ao CIMO (UID/AGR/00690/2019) e bolsa de doutoramento de R.V.C. Cardoso (SFRH /BD/137436/2018); L. Barros e A. Fernandes agradecem o financiamento nacional pela FCT, I.P., no âmbito da celebração do contrato-programa de emprego científico institucional.

Referências

1. Kisiel, W., Barszcz, B., 1997. Minor sesquiterpene lactones from *Lactuca virosa*. *Phytochemistry* 46, 1241–1243.
2. Kim, K.H., Lee, K.H., Choi, S.U., Kim, Y.H., Lee, K.R., 2008. Terpene and phenolic constituents from *Lactuca indica* L. *Arch. Pharm. Res.* 31, 983–988.
3. Wang, X.-X., Gao, X., Jia, Z.-J., 2010. Sesquiterpenoids from *Lactuca tatarica*. *Fitoterapia* 81, 42–44.
4. Monge, M., Kilian, N., Anderberg, A., Semir, J., 2016. Two new records of *Lactuca* L. (Cichorieae, Asteraceae) in South America. *Revista Brasileira de Biociências*. 14. 117-123.
5. Pires, T. C. S. P., Dias, M. I., Barros, L., Calhella, R. C., Alves, M. J., Oliveira, M. B. P. P., Ferreira, I. C. F. R., 2018. Edible flowers as sources of phenolic compounds with bioactive potential. *Food Research International*, 105, 580–588.

Avaliação da atividade catalítica do ácido 12-tungstofosfórico ($H_3PW_{12}O_{40}$) impregnado em carvão ativado nas reações de esterificação do ácido *p*-hidroxibenzóico

Bianca F. Gonçalves¹ (IC), Karla S. Malaquias¹ (PQ)
bianca_aia@hotmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Bacharelado em Química.

Palavras-chave: Esterificação, catálise heterogênea, ácido 12-tungstofosfórico.

Catalizadores são substâncias que diminuem a energia de ativação das reações aumentando a velocidade sem serem consumidos durante o processo. A catálise pode ser homogênea ou heterogênea, a depender da fase em que catalizador e reagentes se encontram. O ácido 12-tungstofosfórico (HPW - *Phosphotungstic Acid*) possui características exclusivas de sítios de Brønsted. É um dos heteropoliácidos mais conhecidos e vem sendo utilizado como catalizador ácido, seja suportado ou na forma protônica. Ao suportar o HPW em materiais com elevada área superficial, tais como: carvão ativado, polímeros, zeolitas, zircônio e sílica, o ácido pode ser introduzido no interior dos poros destes materiais, permitindo aumento na área superficial¹. Neste trabalho utilizou-se o HPW impregnado em carvão ativado (CA) como catalizador na reação de esterificação do ácido *p*-hidroxibenzóico. A impregnação do HPW no CA foi realizada utilizando uma solução de HCl 0,1M mantida em agitação por 24h. A proporção foi de 50% m_{CA}/m_{HPW} . A banda características observada em 802cm^{-1} do HPW no CA/HPW50, usando a espectroscopia no infravermelho (FTIR), confirma a eficiência da impregnação. A atividade catalítica foi testada em reações de esterificação com álcoois com tamanho de cadeia variável. As condições reacionais foram: 7mmol do ácido *p*-hidroxibenzóico, 10% catalisador CA/HPW50, 10mL do álcool (R1: metanol; R2: etanol; R3: isopropanol; R4: butanol; R5: hexanol; R6: octanol; R7: decanol). O meio reacional foi mantido na temperatura de refluxo do respectivo álcool por 4h com agitação constante. A formação dos ésteres foi acompanhada por cromatografia gasosa aliada à espectrometria de massas. Após o término da reação a extração líquido-líquido foi realizada com diclometano e solução brine. Na figura 1 são apresentados os rendimentos das reações.

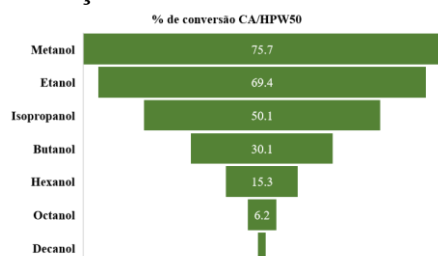


Figura 1. Porcentagem de conversão da reação de esterificação usando diferentes álcoois (nucleófilo).

Como é possível observar, ocorreu um decréscimo do rendimento com o aumento da cadeia alquílica do álcool. Este efeito é relatado nas esterificações de Fischer, pois a nucleofilicidade é reduzida. A atividade catalítica diminuiu no reuso do CA/HPW50 indicando a lixiviação do HPW nos poros do CA. Contudo, a metodologia é promissora para a esterificação com álcoois de cadeia longa sem o uso de catalisadores de custo elevado². Os estudos de otimização das variáveis: temperatura, tempo de reação, % de HPW no CA e porcentagem de catalisador estão em andamento.

Referências

1. Bala, Dharshini D., Vasquez, Victor, Chidambaram, Dev. Ind. Eng. Chem. Res. 2018, 57, 44.
2. Baek, H., Minakawa, M., Yamada, Y. M. A., Han, J. W., & Uozumi, Y. Scientific Reports, 2016, 6, 1.

Avaliação da atividade catalítica na síntese de 3,3'-(4-arylpiridina-2,6-di-il)bis(2H-cromen-2-ona) via reação multicomponente

Bianca F. Souza^{1*} (IC), Luciana M. Ramos¹ (PQ)

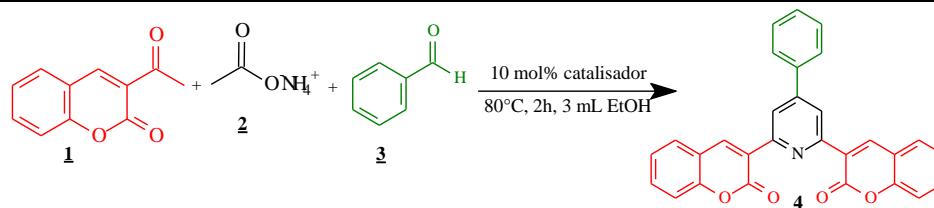
*biancafs30@gmail.com

¹Universidade Estadual de Goiás, Campus CCET, LaQuiMeSo, Anápolis- Goiás, Brasil.

Palavras-chave: Reação multicomponente, piridinas, antioxidante

As reações multicomponentes (RMC) se destacam por possibilitarem a síntese de compostos com potencial farmacológico de forma limpa, caracterizados pela alta economia atômica, prevenção na produção de resíduos tóxicos e eficiência energética.¹ Importantes moléculas obtidas via RMC são as piridinas 2,4,6-trissubstituídas que apresentam propriedades biológicas como antioxidantes, anti-inflamatórias e anticoagulantes.² Destaque importante é dado para os derivados de 3,3'-(4-arylpiridina-2,6-di-il) bis (2H-cromen-2-ona) **4** (Tabela1):

Tabela1: Síntese da 3,3'-(4-arylpiridina-2,6-di-il) bis (2H-cromen-2-ona) e avaliação do catalisador



Catalisador	Estrutura do catalisador	Rendimento (%)
Diácido Imidazol		28%
PEI.LI		13%
MAICl-		21%
MSI		62%
Ácido acético	AcOH	29%

O produto da reação foi analisado por infravermelho e RMN (¹H e ¹³C). Observa-se que o uso do catalisador de líquido iônico MSI foi promissor. Os efeitos da temperatura, tempo de reação e solvente estão sendo analisados com o objetivo de aumentar a conversão do produto. Posteriormente os diferentes derivados terão suas propriedades biológicas investigadas.

Agradecimentos

CAPES-FAPEG, CNPq, BOLSA de IC PIBIC-UEG

Referências

¹Garbarino, S., Ravelli, D., Protti, S., Basso, A. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016, 55, 15476.

²Naik, N.S.; Bhat, N.S.; Hegde, A.G.; Bhat, S.S.; Kirasur, A.; Patil, A.; Shastri, L.A.; Sunagar, V. *Synth. Commun.* **2018**, 48, 511.

Avaliação do potencial biológico de derivados da Pirimidina-5-carbonitrila

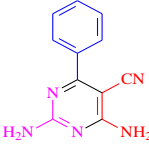
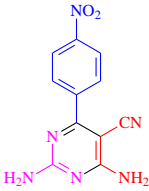
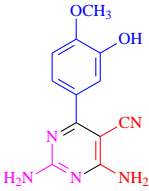
Yasmine B. Queiroz¹ (PG); Juliana G. Morais¹ (PG); Jhonathan R. N. dos Santos¹ (PG); Loraine M. D. Xavier¹ (PG); Osvaldo G. Pinto¹ (PG); Luciana M. Ramos¹ (PQ). yasminequeiroz@gmail.com.

¹Universidade Estadual de Goiás

Palavras-chave: heterocíclicos, pirimidinas, atividade biológica, ação antioxidante.

Os heterocíclicos que contêm pirimidina como núcleo central com diferentes substituintes, como a pirimidina-5-carbonitrila, apresenta várias propriedades biológicas: antibacteriana, anti-inflamatória, antifúngica, anti-HIV e antioxidante.¹ Com isto, as pirimidinas são investigadas como percussores na síntese de novos fármacos.² A presente pesquisa avaliou a atividade antibacteriana e antioxidante dos derivados da 2,4-diamina-6-fenil-pirimidina-5-carbonitrila com diferentes substituintes. A avaliação da atividade bactericida foi realizada por meio do método de microdiluição em várias concentrações frente às bactérias *Staphylococcus aureus* (ATCC 29213) e *Escherichia coli* (ATCC 25312). A avaliação da atividade antioxidante ocorreu através dos métodos do ensaio sequestrante de radical pelo DPPH. Os testes foram baseados em protocolos da literatura.^{3a-b}

Tabela 1. Resultados da bioatividade dos derivados pirimidina-5-carbonitrila.

				
<i>S. Aureus</i> (ATCC 29213)	<u>CMI</u>	250 µg/mL	1000 µg/mL	250 µg/mL
	<u>CMB</u>	500 µg/mL	2000 µg/mL	1000 µg/mL
<i>E. Coli</i> (ATCC 25312)	<u>CMI</u>	500 µg/mL	2000 µg/mL	500 µg/mL
	<u>CMB</u>	500 µg/mL	> 2000 µg/mL	2000 µg/mL
Atividade antioxidante		87,37%	81,01%	89,40%

Observa-se que dois derivados apresentaram ação antibacteriana moderada frente a *S. aureus* e *E. coli*, enquanto que na atividade antioxidante pelo sequestro de radicais nota-se uma atividade moderada quando comparado com o padrão quercetina (95,25%). Observou-se que a ausência de substituintes ou a presença de grupos doadores de elétrons no anel aromático apresentaram melhores ação antibacteriana frente à *S. aureus* e *E. coli* e exibiram melhores potenciais antioxidante pelo método do DPPH. Isto pode significar que derivados de pirimidina-5-carbonitrila sintetizadas podem ser um protótipo com atividades biológicas potencialmente ativas frente a diversas patologias.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPEG, UEG e LaQuiMeSO.

Referências

- Ghomi, J.S., Bakhtiari, A. *Chemistry Select*, **2018**, 3, 12704.
- Kalita, S.J., Bayan, R., Devi, J., Brahma, S., Mecadon, H. Deka, D. *Tetrahedron Lett.* **2017**, 58, 566.
- a) Manetti, L. M.; Turra, A. F.; Takemura, O. S.; Svidzinski, T. I. E.; Laverde Junior, A. *Rev. Bras. Plantas Med.* **2010**, 12, 406. b) Gülçin, I. *Arch Toxicol*, **2012**, 86, 3, 345.

Avaliação *in silico* do potencial multialvo de novos derivados heterocíclicos nas enzimas Acetilcolinesterase e BACE-1

Valdinei B. L. Filho¹ (PG), Tauã E. Silva²(IC), Fábio L. P. Costa^{1,2} (PQ), Breno A. Soares^{1,2} (PQ). tauaemanuel99@gmail.com.

¹Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade Federal de Jataí. ²Curso de Bacharelado em Química, Universidade Federal de Jataí.

Palavras-chave: Doença de Alzheimer, *Docking* molecular, Modelagem molecular, Fármacos multialvo.

Introdução: A Doença de Alzheimer (DA) é uma enfermidade crônico-degenerativa causada pela deposição do peptídeo β -amilóide (β A) em placas senis neurotóxicas nas células nervosas,¹ e responsável por 70% dos casos de demência no mundo, podendo levar a morte.² A causa principal da DA consiste no déficit da transmissão colinérgica e estudos recentes indicam que existem diversos fatores (alvos biológicos) e eventos bioquímicos associados a DA, caracterizando esta doença como multifatorial. A principal estratégia de ação dos fármacos disponíveis no mercado consiste na inibição da enzima acetilcolinesterase (AChE), entretanto, devido à complexidade de fatores causadores, estratégias de planejamento de candidatos a fármacos com potencial de ação multialvo tem emergido na literatura nos últimos anos.³ Nesse contexto, a utilização de métodos computacionais tem enorme importância na identificação e no desenvolvimento de novas moléculas bioativas a partir de coleções de compostos reais ou virtuais. **Objetivo:** Avaliar o potencial *in silico* de uma série de compostos heterocíclicos híbridos inéditos da classe 1,2,4-triazol-3-tiol em dois alvos desencadeadores da DA (AChE e BACE-1) a fim de obter resultados que possam justificar a seleção de novos compostos para ensaios biológicos. **Metodologia:** Inicialmente foi feita uma pesquisa no sítio do *Protein Data Bank* para seleção dos alvos de interesse. Os alvos selecionados foram validados através do *redocking* do seu respectivo ligante experimental utilizando o programa GOLD (ambos com RMSD < 1Å). As estruturas dos ligantes foram modeladas utilizando o programa Discovery Studio e otimizadas através da interface Mercury CSD. Todos os derivados foram construídos de acordo com o estado de protonação intracelular (7,4). Posteriormente, foram realizadas as simulações de *docking* com o programa GOLD, considerando todos os ligantes flexíveis (80 corridas para cada). O sítio de ligação das enzimas estudadas foi definido com todos os resíduos dentro de uma esfera de 10 Å de raio localizado ao centro do sítio ativo. **Resultados e Discussões:** Os ligantes foram classificados de acordo com a função de pontuação ChemPLP, que classifica as orientações das moléculas avaliadas de acordo com um padrão de afinidade (pontuação ou score), levando-se em conta a estabilidade energética em relação ao sítio ligante da proteína. Uma verificação visual foi realizada para seleção das melhores poses daqueles ligantes que apresentaram a melhor pontuação, revelando interações com resíduos de aminoácidos. Nesse sentido, o derivado *1,2,4-triazólico_n3sat_R5a* se destacou apresentando valores de pontuação satisfatórios para ambas as enzimas AChE (PBD id: 2CMF) 122,23 e BACE-1 (PBD id: 4ZPE) 78,66. **Conclusões:** Em ambos os alvos, ficou evidenciado interações do ligante com os mesmos resíduos de aminoácido que as enzimas AChE e BACE-1 apresentaram com seus respectivos ligantes experimentais, indicando o derivado *1,2,4-triazólico_n3sat_R5a* como um potencial candidato a protótipo multialvo. **Agradecimentos:** UFG e Capes.

Referências

1. Blennow, K.; de Leon, M. J.; Zetterberg, H. Alzheimer's disease. *Lancet*, v. 368, p. 387–403, 2006.
2. Prince, M.; Comas-Herrera, A.; Knapp, M.; Guerchet, M.; Karagiannidou, M. World Alzheimer Report 2016 Improving healthcare for people living with dementia. Coverage, Quality and costs now and in the future. *Alzheimer's Dis. Int.* 1–140, 2016.
3. Ramsay, R. R., Popovic-Nikolic, M. R., Nikolic, K., Uliassi, E; Bolognesi, M. L. A perspective on multi-target drug discovery and design for complex diseases. *Clinical and translational medicine*, 7(1), 3, 2018.

Avaliação *in silico* do potencial multialvo de novos derivados heterocíclicos nas enzimas Acetilcolinesterase e GSK-3 β

Tauã E. Silva¹ (IC); Valdinei B. L. Filho² (PG); Fabio L. P. Costa^{1,2} (PQ), Breno A. Soares^{1,2} (PQ). tauaemanuel99@gmail.com.

¹Curso de Bacharelado em Química, Universidade Federal de Jataí. ²Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade Federal de Jataí.

Palavras-chave: Doença de Alzheimer, Modelagem molecular, Estudos de *docking*, Fármacos multialvo.

Introdução: A Doença de Alzheimer (DA) é uma doença neurodegenerativa, que se caracteriza sintomaticamente pela diminuição progressiva da memória e déficit cognitivo, estando associada à degradação de neurônios colinérgicos no sistema nervoso central, podendo levar a óbito.^{1,2} A inibição da enzima acetilcolinesterase (AChE) consiste na principal estratégia de ação dos fármacos disponíveis no mercado atualmente, todavia, a literatura recente indica uma série de fatores causadores (alvos biológicos), evidenciando a DA como uma doença multifatorial e alavancando a busca por fármacos multifuncionais.³ Nesse cenário, a utilização de métodos computacionais tem enorme importância na identificação e no planejamento de novas moléculas bioativas a partir de coleções de compostos reais ou virtuais. **Objetivo:** Avaliar o potencial *in silico* de uma série de compostos heterocíclicos híbridos inéditos da classe 1,3,4-tiadiazólio-2-amino em dois alvos desencadeadores da DA (AChE e GSK-3 β) a fim de obter resultados que possam justificar a seleção de novos compostos para ensaios biológicos.

Metodologia: Inicialmente foi feita uma pesquisa no sítio do *Protein Data Bank* para seleção dos alvos de interesse. Os alvos selecionados foram validados através do *redocking* do seu respectivo ligante experimental utilizando o programa GOLD (ambos com RMSD < 1Å). As estruturas dos ligantes foram modeladas utilizando o programa Discovery Studio e otimizadas através da interface Mercury CSD. Todos derivados foram construídos de acordo com o estado de protonação intracelular (7,4). Em seguida foram realizadas as simulações de *docking* com o programa GOLD, considerando todos os ligantes flexíveis (80 corridas para cada). O sítio de ligação das enzimas estudadas foi definido com todos os resíduos dentro de uma esfera de 10 Å de raio localizado ao centro do sítio ativo. **Resultados e Discussões:** Os ligantes foram classificados de acordo com a função de pontuação ChemPLP, que classifica as orientações das moléculas avaliadas de acordo com um padrão de afinidade (pontuação ou score), levando-se em conta a estabilidade energética em relação ao sítio ligante da proteína. Uma verificação visual foi realizada para seleção das melhores poses daqueles ligantes que apresentaram a melhor pontuação, revelando interações com resíduos de aminoácidos. Nesse sentido, o derivado *1,3,4-tiadiazólio_n2sat_R5a* se destacou apresentando valores de pontuação satisfatórios para ambas as enzimas AChE (PBD id: 2CMF) 125,11 e GSK-3 β (PBD id: 4AFJ) 71,71 respectivamente. **Conclusões:** Em ambos os alvos, ficou evidenciado interações do ligante com os mesmos resíduos de aminoácido que enzimas AChE e GSK-3 β apresentaram com seus respectivos ligantes experimentais, indicando o derivado *1,3,4-tiadiazólio-2-amino_n2sat_R5a* como um potencial candidato a protótipo multialvo.

Agradecimentos: UFG e Capes.

Referências

1. Blennow, K.; de Leon, M. J.; Zetterberg, H. Alzheimer's disease. *Lancet*, v. 368, p. 387–403, 2006.
2. Prince, M.; Comas-Herrera, A.; Knapp, M.; Guerchet, M.; Karagiannidou, M. World Alzheimer Report 2016 Improving healthcare for people living with dementia. Coverage, Quality and costs now and in the future. *Alzheimer's Dis. Int.* 1–140, 2016.
3. Ramsay, R. R., Popovic-Nikolic, M. R., Nikolic, K., Uliassi, E; Bolognesi, M. L. A perspective on multi-target drug discovery and design for complex diseases. *Clinical and translational medicine*, 7(1), 3, 2018.

***Bauhinia holophylla* E INIBIÇÃO DA ARGINASE DE *L. amazonensis*.**

Thais B. Vieira^{1*} (IC), Camila L. Silva² (PG), Bruno S. do Amaral³ (PG), Dulce H. F. de Souza³ (PQ), Izabela M. D. B. Charneau² (PQ), Richele P. Severino¹ (PQ), Lorena R. F. de Sousa¹ (PQ) *thais_bvieira@hotmail.com*

¹Universidade Federal de Catalão, Unidade Acadêmica Especial de Química, Catalão, GO, Brasil, ²Universidade de Brasília, Departamento de Biologia Celular, Laboratório de Interação Patógeno-Hospedeiro, Asa Norte, Brasília, DF, Brasil, ³Universidade Federal de São Carlos, Departamento de Química, Rodovia Washington Luís, Km 235, São Carlos, SP, Brasil.

Palavras-chave: *Bauhinia*, flavonoides, arginase, *Leishmania*.

A espécie *Bauhinia holophylla* é um arbusto do Cerrado usada no Brasil como planta medicinal para o tratamento de diabetes e inflamações. O estudo fitoquímico das folhas de *B. holophylla* trouxe a caracterização de flavonoides tais como quercetina e isoramnetina¹. Em vista que não há investigação das cascas do caule desta planta, a espécie *B. holophylla* foi selecionada para realização da prospecção química das frações ativas frente à arginase de *Leishmania amazonensis*.

O fracionamento do extrato de acetato de etila da casca do caule (BhCcEA = 500 mg) foi feito através de cromatografia, usando como fase estacionária a sílica gel (60-200 mesh, h = 16 cm x Φ = 4 cm). A fase móvel foi isocrática com acetato:hexano 15%. Após análise por cromatografia de camada delgada (CCD), foram obtidas 16 frações (Bh1-Bh16). Os ensaios em arginase de *L. amazonensis* (ARG) foram realizados através do ensaio em solução *in vitro* por espectrofotometria (comprimento de onda de 600 nm) (Espectrofotômetro VARIAN Cary) através do produto reacional de azul de indofenol.² As frações também foram avaliadas *in vitro* frente ao protozoário de *Leishmania infantum* usando incubação com solução de rezazurina e leitura da fluorescência (570 nm_{ex}/595 nm_{em}) em microplate reader SpectraMax M5 (Molecular Devices). A anfotericina B foi utilizada como controle positivo no ensaio e todos experimentos foram feitos em triplicada e repetidos em experimentos independentes.³

Quanto à inibição em ARG a fração Bh14 apresentou 82,34% de inibição, entretanto não houve inibição do protozoário. O RMN ¹H da fração ativa apresentou sinais na região de aromáticos, os quais são característicos em espectros de flavonoides. Esses sinais são os dubletos em 5,7 e 5,9 ppm os quais mostram um acoplamento em meta, possivelmente do anel A do flavonoide e os sinais entre 6,5 e 7,5 ppm (anel B). Na literatura os flavonoides são reportados como inibidores de arginase de *Leishmania amazonensis*² o que poderia justificar a atividade biológica encontrada nesta fração. As perspectivas futuras deste trabalho incluem a determinação do IC₅₀ da fração ativa e a realização da prospecção química desta fração utilizando RMN 2 D e CLUE-EM/EM.

Agradecimentos

CNPq e CAPES.

Referências

1. Ribeiro, D.L., Cilião, H. L., Specian, A. F. L., Serpeloni, J. M., de Oliveira, M. T., Varanda, E. A., Vilegas, W., Saldanha, L. L., Martínez-López, W., Dokkedal, A. L., Cólus, I. M. S., Cytotechnology, 2018, 70, 713.
2. de Sousa, L. R. F., Ramalho, S. D., Burger, M. C. M., Nebo, L., Fernandes, J. B., da Silva, M. F. G. F., Iemma, M. R. C., Corrêa, C. J., de Souza, D. H. F., Lima, M. I. S., Vieira, P. C., Journal of Natural Products, 2014, 77, 392.
3. Andrade, M.A., Azevedo, C.S., Motta, F.N., dos Santos, M.L., Silva, C.L., Santana, J.M., Bastos, I.M.D., BMC Complementary and Alternative Medicine, 2016, 16, 444.

Composição química do óleo essencial da casca de *Zanthoxylum riedelianum* (Rutaceae)

Larissa Liz S. Lara¹ (PG), Cristiane de M. Casal² (PQ), Cássia Cristina F. Alves³ (PQ), Vinícius A. do Nascimento⁴ (PG). *lizquimica14@gmail.com*

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano – Campus Rio Verde – GO, ²Instituto Federal do Sudoeste de Minas – Campus Barbacena – MG, ³Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano – Campus Rio Verde – GO, ⁴Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano – Campus Rio Verde – GO.

Palavras-chave: Hidrodestilação, óleo essencial, composição química, *zanthoxylum riedelianum*.

Os óleos essenciais produzidos pelas plantas são constituídos de compostos orgânicos voláteis denominados metabólitos secundários. Hidrocarbonetos e compostos oxigenados são as espécies químicas presentes em sua composição complexa. A composição química varia entre as espécies e partes do vegetal, além de ser afetada pelo local de cultivo, condições de coleta, estabilização e fatores climáticos. Estudos anteriores mostraram que as folhas e os frutos de *Zanthoxylum riedelianum* (Rutaceae) possuem óleo essencial. Não foram encontrados registros de estudos do óleo essencial da casca do seu tronco. O vegetal é conhecido popularmente como maminha-de-porca, e é encontrado no centro-oeste do Brasil. Dessa forma, o presente trabalho tem como objetivo analisar a composição química do óleo essencial da casca do tronco da espécie *Zanthoxylum riedelianum*. O material vegetal foi coletado em Israelândia-Goiás, o óleo essencial foi extraído por hidrodestilação em aparelho clewenger e analisado por cromatografia gasosa acoplada a espectrômetro de massas (CG-EM). O padrão de fragmentação dos compostos obtidos na análise cromatográfica foi comparado com o padrão da biblioteca do equipamento e confirmado com dados da literatura. Ao final do processo de hidrodestilação da casca de *Zanthoxylum riedelianum*, observou-se o óleo essencial com coloração amarelada e obteve-se rendimento médio 0,02% ± 0,006. Foram identificados treze compostos químicos no óleo essencial da casca da espécie *Zanthoxylum riedelianum*, os majoritários são: E-nerolidol (67,21%), α -selinene (14,94%), β -selinene (7,41%), 4-Hidroxi-4-metil-2-pentanona (1,50%), β -elemene (3,36%) e *Trans*- α -bergamotene (2,68%). Concluiu-se que a casca da espécie *Zanthoxylum riedelianum* possui óleo essencial de cor amarelada e odor forte característico. Um dos compostos majoritários não foi identificado. É importante ressaltar que é o primeiro registro sobre o óleo essencial da casca de *Zanthoxylum riedelianum*, o que contribui para o conhecimento da espécie.

Agradecimentos

Aos laboratórios do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano – Campus Rio Verde – GO e CNPq pelo auxílio financeiro.

Referências

1. ADAMS, R. P. *Carol Stream: Allured Publishing Corporation*, 2007, 4, 804.
2. COSTA, E. C. C., CHRISTOFOLI, M., COSTA, G. C. D. S., PEIXOTO, M. F., FERNANDES, J. B., FORIM, M. R., PEREIRA, K. D. C., SILVA, F. G., CAZAL, C. D. M. *Scientia horticultrae*, 2017, 226, 327.
3. MIRANDA, C. A. S. F., CARDOSO, M. G., BATISTA, L. R., RODRIGUES, L. M. A., FIGUEIREDO, A. C. S. *Revista Ciência Agronômica*, 2016, 47, 213.

Descoberta de novos inibidores de NS2B-NS3 protease de Zika através da integração de triagem virtual e avaliação experimental

Bruna K. P. Sousa^{1*} (PG); Melina Mottin¹ (PQ); Bruno J. Neves¹ (PQ); Daniel Foil⁴ (PQ); Jean A. Bernatchez^{2,3} (PQ); Sean Ekins⁴ (PQ); Jair L. Siqueira-neto^{2,3} (PQ); Carolina H. Andrade¹ (PQ)

e-mail: brunakatieledeps@gmail.com

¹ Laboratório de Planejamento de Fármacos e Modelagem Molecular - LabMol. Faculdade de Farmácia. Universidade Federal de Goiás -Brasil.

² Skaggs School of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences, University of California, San Diego, La Jolla, California, USA

³ Center for Discovery and Innovation in Parasitic Diseases, University of California, San Diego, La Jolla, California, USA

⁴ Collaborations Pharmaceuticals, Inc., Raleigh, NC, USA

Palavras-chave: Zika, Descoberta de fármacos, NS3-protease, Triagem virtual.

O vírus Zika (ZIKV) é um flavivírus emergente, responsável por diversos distúrbios neurológicos, como a microcefalia e a Síndrome de Guillain-Barré em adultos¹⁻³. A proteína NS2B-NS3 protease de ZIKV está intimamente envolvida no processamento da poliproteína durante a replicação viral, sendo um alvo potencial para desenvolvimento de antivirais¹. Até o momento, não há antivirais ou vacinas aprovadas para tratar a infecção, sendo urgente a pesquisa e o desenvolvimento de fármacos contra ZIKV. Neste trabalho, foram integradas estratégias computacionais como a triagem virtual, para filtrar uma biblioteca de milhões de compostos comerciais e ensaios experimentais celulares e enzimáticos para validar os resultados. Na triagem virtual, foram aplicados quatro filtros computacionais para priorizar os compostos a serem testados: I. Filtro de propriedades *drug-like* (regras dos 5 de Lipinski e Veber); II. Filtro de *docking* molecular proteína-ligante; III. Filtro de aprendizado de máquina para ZIKV e IV. Filtro de propriedades farmacocinéticas (ADME). A partir da triagem virtual, 8 compostos foram priorizados e adquiridos. Esses compostos foram então testados experimentalmente utilizando uma plataforma de *High-Content Screening* baseada em imagem, utilizando células-tronco de glioblastoma infectadas com ZIKV. Um composto mostrou-se bastante promissor apresentando EC₅₀ de 0,6 nM e baixa citotoxicidade CC₅₀ > 100 uM em células de mamíferos. Posteriormente, foram realizados ensaios em células progenitoras neurais humanas também infectadas com ZIKV. Os níveis de inibição desse composto se mantiveram em escala de nanomolar, com valores de EC₅₀ de 4,3 nM ± 0,3 nM, demonstrando efeito neuroprotetor. Os ensaios em células corroboraram com os resultados computacionais obtidos e evidenciam a importância dessas técnicas para acelerar o desenvolvimento de fármacos. Além disso, ensaios enzimáticos serão realizados para validar as previsões, além de determinar o modo de inibição desse candidato.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPEG, e World Community Grid-IBM.

Referências

1. Mottin, M. *et al.* The A–Z of Zika drug discovery. *Drug Discov. Today* 23, 1833–1847 (2018).
2. Cao-Lormeau, V. M. *et al.* Guillain-Barré Syndrome outbreak associated with Zika virus infection in French Polynesia: A case-control study. *Lancet* 387, 1531–1539 (2016).
3. Cugola, F. R. *et al.* The Brazilian Zika virus strain causes birth defects in experimental models. *Nature* 534, 267–271 (2016).

Desenvolvimento e validação de modelos de aprendizado de máquina para seleção de xantonas inibitórias do receptor do fator de crescimento endotelial (EGFR)

Luiza V. Cruz^{1*} (IC), Steven U. S. Hall² (PG), Melina Mottin² (PQ), Vanessa G. P. Severino¹ (PQ), Carolina H. Andrade² (PQ). **melvieirabio@gmail.com*

¹Laboratório de Produtos Naturais - LabPN, Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Goiás.

²Laboratório de Planejamento de Fármacos e Modelagem Molecular – LabMol, Faculdade de Farmácia, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Goiás.

Palavras-chave: *Kielmeyera*, Xantonas, EGFR, Aprendizado de máquina.

Espécies do gênero *Kielmeyera* são utilizadas na medicina popular devido a presença de xantonas, estruturas heterocíclicas que apresentam diferentes atividades farmacológicas de acordo com os substituintes¹. O receptor do fator de crescimento endotelial (EGFR) é um importante alvo terapêutico para o tratamento de câncer, sendo a perda de função desse receptor relacionada ao surgimento de neoplasias². A atividade inibitória de algumas xantonas frente ao EGFR foi descrita e comparada ao tratamento de primeira linha utilizado para esses receptores, indicando a potencialidade desses compostos³. Este trabalho visou desenvolver modelos de aprendizado de máquina capazes de identificar inibidores de EGFR e prever a atividade de xantonas descritas para o gênero *Kielmeyera*. Dados relacionados a inibição de EGFR foram coletados da base de dados ChEMBL e processados de acordo com um protocolo bem estabelecido na literatura⁴, passando por etapas de filtragem e padronização dos dados. Para o desenvolvimento dos modelos, o método de aprendizado de máquina *Random forest* e quatro descritores moleculares (*MACCS*, *Avalon*, *Morgan*, *AtomPair*) foram utilizados. Os modelos foram gerados a partir de um conjunto de dados de 218 compostos (109 ativos e 109 inativos), com validação cruzada 5-fold. O melhor modelo foi obtido com o descritor *Morgan* e apresentou os seguintes resultados: taxa de classificação correta de 82%, sensibilidade de 82% e especificidade de 83%. Dessa forma, concluiu-se que foram gerados modelos de aprendizado de máquina robustos e preditivos para predição de inibidores de EGFR. O conjunto de xantonas utilizado para a triagem virtual foi obtido a partir de compostos descritos para o gênero *Kielmeyera* e de xantonas constituintes da biblioteca de compostos do laboratório de pesquisa de produtos naturais (LabPN - UFG). As xantonas foram triadas utilizando o melhor modelo e as selecionadas como ativas serão isoladas do extrato etanólico de *Kielmeyera*, identificadas por cromatografia de camada delgada e RMN para posterior avaliação experimental.

Agradecimentos:

Somos gratos à FAPEG, CAPES, ao PRPI, ao CNPQ e a UFG, pelo apoio financeiro (PI02494-2016)

Referências

1. Shagufta & Ahmad, I. *European Journal of Medicinal Chemistry* (2016) **116**, 267-280
2. Lopes, G. L., Filippo, Q. V. E. & De Castro Junior, J. *J Bras Pneumol* (2015) **41**, 365–375.
3. Duangsrirai, S. *et al. Molecules* (2014) **19**, 19923–19934.
4. Tropsha, A. *Molecular Informatics* (2010) **29**. 476-488.

Diferenciação entre os perfis metabólicos dos peitos de frangos de granja e caipiras usando RMN e quimiometria

Enya S. de Oliveira¹ (IC)*, Gerlon de A. R. Oliveira¹ (PQ), Andressa K. Silva¹ (PG), Luciano M. Lião¹ (PQ).

¹Universidade Federal de Goiás

*e-mail: enyasb8@gmail.com

Palavras-chave: frango, granja, caipira, RMN, quimiometria

O Brasil se destaca como maior exportador de carne de frango.¹ O sistema extensivo de criação de frangos, embora menos rentável que o sistema intensivo, oferece condições de maior bem-estar aos animais, e os frangos caipiras são preferidos por muitos consumidores.² Neste trabalho foi utilizada a técnica de RMN de ¹H associada à quimiometria para estudo dos perfis metabólicos dos peitos de frangos de granja e caipiras. Para isso, 150 mg de músculo peitoral foi agitado com 700 µL de D₂O em um extrator fast-prep. A mistura foi centrifugada e o sobrenadante coletado para análise de RMN de ¹H. Os dados espectrais foram submetidos a tratamento quimiométrico que permitiu discriminar a origem dos frangos pelos sinais de ¹H da anserina, leucina e alanina. Foram encontrados biomarcadores com potencial para distinguir o sistema de produção no mercado de frangos, além de auxiliarem no entendimento da qualidade da carne de frango.

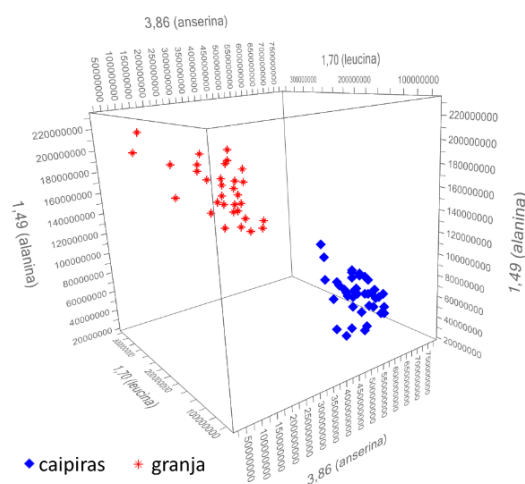


Figura 1 – Discriminação dos peitos de frangos caipiras e de granja pelas áreas dos sinais de RMN de ¹H da alanina, anserina e leucina.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq, à FAPEG e à FINEP pelo apoio financeiro.

Referências

1. ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE PROTEÍNA ANIMAL (ABPA). Relatório Anual 2018. Brasil, 2018. Disponível em: <<http://abpa-br.com.br/storage/files/relatorio-anual-2018.pdf>>. Acesso em: 28 jan. 2020.
2. Shields, S. & Duncan, I. J. H. An HSUS Report: A Comparison of the Welfare of Hens in Battery Cages and Alternative Systems. *Hum. Soc. United States*, 2009, 1–27.

Efeito dos óleos essenciais na atividade biológica cardiovascular – Uma revisão

Juliana Morais dos Reis¹(PG), Liliane Nebo¹(PQ), Claudinei Alves da Silva¹(PQ), Fábio M. de Oliveira²(PQ), Núbia de Souza Lobato²(PQ), Karla S. Malaquias¹(PQ)
jreisr2@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Programa de Pós-Graduação em Química.

²Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências da Saúde/Programa de Pós-Graduação em Ciências Aplicadas à Saúde.

Palavras-chave: Óleo essencial, doenças cardiovasculares e pressão arterial.

Segundo a Organização Mundial de Saúde, 80% da população mundial faz uso de medicamentos obtidos a partir das plantas medicinais. Tal fato reflete nas políticas e programas do governo como a criação da Política Nacional de Plantas Medicinais e Fitoterápicos. Que visa garantir à população brasileira o acesso seguro e uso racional, além de promover a biodiversidade sustentável destas plantas¹. As plantas medicinais produzem uma série de moléculas, dentre estas, as voláteis compõem os óleos essenciais. Estes apresentam em sua composição uma mistura complexa de metabólitos secundários geralmente, pertencente à classe dos terpenos (mono e sesquiterpenos) e fenilpropanos. Há várias propriedades farmacológicas relatadas na literatura para os metabólitos presentes nos óleos essenciais, tais como: antibacterianas, antifúngicas, antioxidantes, antineoplásicas, hipotensora e vasorelaxante. Assim, o objetivo do presente trabalho foi revisar os efeitos cardiovasculares dos óleos essenciais. Os dados desta pesquisa foram coletados nos portais da *Internet Pubmed*, *ScienceDirect* e *Scopus* entre os anos de 1990 e 2019. Foi incluída no estudo a expressão óleo essencial relacionada às palavras individuais: cardiovascular, cardiomiócito, miócito, hipotensão, vasorelaxante, artéria, vasodilatador e aorta. As principais plantas relatadas nos artigos publicados foram: *Ocimum gratissimum*, *Croton zehntneri*, *Aniba canelilla*, *Cymbopogon winterianus*, *Hyptis fruticosa*, *Mentha piperita*, *Schinus areira L.*, *Citrus bergamia*, *Alpinia zerumbet*, *Croton nepetaefolius*, *Aniba canelilla Bark*, *Croton argyrophyllodes*, *Cymbopogon citratus*, *Alpinia zerumbet*, *Alpinia zerumbet*, *Seseli pallasii Besser*, *Pogostemon elsholtzioides*, *Artemisia campestris L.*, *Trachyspermum ammi*, *Protium heptaphyllum*, *Rosa indica L.*, *Lippia alba*, *Rosmarinus officinalis*, *Piper nigrum*, *Cinnamomum camphora*, *Eucalyptus sp.*, *Hyssopus officinalis*, *Mentha x piperita*, *Rosmarinus officinalis*, *Salvia officinalis*, *Thymallus thymallus* e *Cinnamomum verum*. Nestas, as moléculas que se destacam pelos efeitos no sistema cardiovascular são: α -pineno, α -limoneno, α -terpinen-4-ol, α -terpineol, β -cimeno, eucaliptol (1,8-cineol), carvacrol, citronelol, mentol, mirrenal, linalol, mirtenal, mirtenol, óxido de piperitenona, sobrerol, timol, álcool perfílico e 1-nitro-2-feniletano. De forma geral, a atividade cardíaca depende fluxo de íons cálcio nas células do miocárdio, assim, aquelas que causem interferência no fluxo apresentam determinados efeitos². Os principais observados para as moléculas encontradas foram: vasorelaxação, diminuição da frequência cardíaca e pressão arterial. Também foi reatada a interação destas moléculas na potencialização do efeito dos fármacos comerciais para doenças cardiovasculares.

Referências

1. Ministério da Saúde. Fitoterapia no SUS e Prog. Pesq. de Plantas Med. Cent. Medicamentos, 2006.
2. Fearnley, C. J., Roderick, H. L., Bootman, M. D. Cold Spring Harb Perspect Biol, 2011,3, 11.

ELETROXIDAÇÕES DE SUBSTÂNCIAS ORGÂNICAS CATALISADAS POR UM NOVO AQUACOMPLEXO TRIPIRIDILDIFOSFÍNICO DE RUTÊNIO (II)

Claudemir Batalini¹ (PQ), Wagner F. De Giovanni² (PQ) – *pirapotimao@msn.com*

¹ Universidade Federal de Mato Grosso - ICET/CUA, LAPQUÍM - Unidade I - Pontal do Araguaia - MT.

² Universidade de São Paulo, FFCLRP - Ribeirão Preto - SP.

Palavras-chave: Eletrocatalise, eletroxidação, funções orgânicas, complexo de rutênio.

Diferentes funções orgânicas podem sofrer reações de oxidação, sendo que atualmente o meio acadêmico e a indústria química procuram desenvolver cada vez mais processos que se alinham com os processos da chamada Química Verde visando criar processos mais sustentáveis.¹ A transferência de elétrons através de complexos metálicos em processos eletroquímicos, surgem assim como uma alternativa importante nesses processos oxidativos pois envolvem muitas vezes reações em meio aquoso e requerem quantidades catalíticas do complexo. O objetivo deste trabalho foi testar a habilidade como eletrocatalisador de um novo aquacomplexo tripiridildifosfínico de rutênio (II) sintetizado por nosso grupo de pesquisa,² $[\text{Ru}(\text{L})(\text{totpy})(\text{OH}_2)](\text{ClO}_4)_2$ ($\text{L}=\text{Ph}_2\text{PCH}_2\text{CH}_2\text{PPh}_2$); (*totpy*=4'-(4-toluil)-2,2':6',2''-tripiridina), em experimentos de eletroxidação de substâncias orgânicas de diferentes funções. As eletroxidações foram conduzidas sob potencial constante de +1,00 V (*vs* ECS), em solução 7:3 tampão fosfato:t-butanol, pH 8,1, com a proporção de 1,00 mmol.L⁻¹ do aquacomplexo $[\text{Ru}(\text{L})(\text{totpy})(\text{OH}_2)](\text{ClO}_4)_2$ para 50,00 mmol.L⁻¹ de cada substrato orgânico. As substâncias orgânicas de partida oxidadas e os respectivos produtos obtidos foram: álcool benzílico (benzaldeído), benzaldeído (ácido benzóico), éter benzilbutílico (benzaldeído e ácido benzóico) e 1-feniletanol (acetofenona). Todas as reações apresentaram-se seletivas e com bons rendimentos para os produtos. O processo eletroquímico utilizado neste trabalho revelou algumas vantagens frente a outros métodos oxidativos clássicos, como os biológicos e os oxidantes inorgânicos, ressaltando-se a possibilidade de utilizar meio aquoso nas reações, a rapidez, a seletividade na formação dos produtos e o fato de se poder usar pequena escala de catalisador.

Agradecimentos

À USP-FFCLRP, UFMT-CUA e ao LAPQUÍM pelo suporte científico nas atividades desenvolvidas e à CAPES, pela bolsa de doutoramento.

Referências

1. Song, Q. W.; Zhou, Z. H.; He, L. N. **Green Chem.**, 2017, 19, 3707.
2. Batalini, C. Síntese de aquacomplexos de rutênio e aplicação em eletroxidações de compostos orgânicos, em fases homogênea e heterogênea (eletrodos modificados), 97 f., **Tese de doutorado**. USP – FFCLRP – Ribeirão Preto (SP), 1998.

Estudo da aplicação do *biochar* obtido da torta de mamona como catalisador heterogêneo (acidificado com os ácidos sulfúrico e 12-tungstofosfórico) na reação de transesterificação do óleo de rícino

Marya H. M. Martins¹(IC), Karla S. Malaquias²(PQ)

maryahedwardda@hotmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Licenciatura em Química.

²Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Programa de Pós-Graduação em Química.

Palavras-chave: Torta de mamona, óleo de rícino, *biochar* e transesterificação.

O óleo da mamona (*Ricinus communis*), dentre as oleaginosas comercializadas, tem características diferenciadas pois, 90% de seus triglicerídeos corresponde ao ácido graxo ricinoléico (12-hidroxi-cis-9-octadecenóico)¹. A hidroxila na posição 12 possibilita que este óleo seja uma matéria-prima para diversos produtos químicos de alto valor agregado *in natura* ou funcionalizado por meio de reações químicas. Contudo, cada tonelada de semente de mamona processada, leva a formação de aproximadamente 620 kg de casca e 530 kg de torta de mamona². O presente trabalho apresenta uma alternativa sustentável e de baixo custo para este resíduo, a produção de bio-carvão (*biochar*) ativado para ser utilizado na catálise heterogênea em reações de transesterificação. A extração do óleo de rícino foi realizada com o aparato de *Soxhlet* com três solventes diferentes: hexano, metanol e etanol, por 60min na temperatura de refluxo. O resíduo da extração foi submetido à pirólise 600°C por 60 min. Os catalisadores com *biochar* de torta de mamona (BTM) foram preparados de duas formas distintas. Para o BTMS (*biochar* de torta de mamona sulfonado) o ácido sulfúrico concentrado foi adicionado na razão de 5:1(m_{ácido}/m_{torta de mamona}) a 90°C e deixado em agitação por 20h. Após a ativação, o BTMS foi lavado com água destilada e seco em estufa à 60°C por 24h. Para o BTMW [*biochar* de torta de mamona com o ácido 12-tungstofosfórico (HPW - H₃PW₁₂O₄₀)] a impregnação foi realizada na proporção de 50% em massa de HPW em relação ao *biochar*. A solução foi deixada sob agitação por 24 horas. A secagem foi realizada em estufa durante 8 horas à 100 °C. Posteriormente o material foi calcinado por 3h à 400°C. Para a comparação de eficiência dos catalisadores BTMS e BTMW as reações de transesterificação foram realizadas nas seguintes condições: 200mg de óleo de rícino; 1 mg (10%) do catalisador (KOH, BTMS e BTMW); 2mL de metanol; temperatura 110°C; tempo de reação 6h com agitação e refluxo. Os ésteres foram obtidos por extração líquido-líquido com hexano. A formação destes foi acompanhada por cromatografia gasosa aliada à espectrometria de massas. O solvente que demonstrou melhor rendimento na extração do óleo foi o metanol (33,1%), seguido do etanol (32,2%) e hexano (30,4%). O rendimento médio da reação utilizando o BTMS foi de 61% de conversão. Já para BTMW o resultado foi comparável ao da catálise básica (95%), processo industrial comumente utilizado, com 92% de conversão. No reuso do BTMW observou-se um decaimento de 4% no teor de éster no 2º ciclo e 7% no 3º ciclo. Evidenciando assim, a capacidade catalítica e potencial do BTMW como catalisador “verde”.

Referências

1. Elango, R. K., Sathiasivan, K., Muthukumar, C., Thangavelu, V., Rajesh, M., Tamilarasan, K. *Microchemical Journal*, 2019, 145, 1162.
2. Silva, S. D., Presotto, R. A., Marota, H. B., Zonta, E. *Pesquisa Agropecuária Tropical*, 2012, 42, 19.

Estudo das propriedades físico-químicas e compostos voláteis presentes em polpas de *Mauritia flexuosa* L.f. (Buriti) no Estado do Tocantins.

Marcleane M. Silva¹ (IC), Flamys L. N. Silva¹ (PQ), Adriana I. T. Oliveira^{1*} (PQ).
dritorcato@uft.edu.br.

¹Curso de Licenciatura em Química, Universidade Federal do Tocantins, 77838-284, Araguaína - TO, Brazil.

Palavras-chave: polpa de buriti, *Mauritia flexuosa*, HS-SPME.

No presente trabalho foram avaliados os parâmetros físico-químicos e foi realizada a extração e identificação de compostos voláteis das polpas artesanais de buriti (*Mauritia flexuosa* L.f.) provenientes das cidades de Filadélfia e Palmeiras ambas no estado do Tocantins. Para as análises físico-químicas foram obtidos: pH 3,59, ATT = 14,84 %, cinzas 67,32 % e umidade 75,29 % em Filadélfia e pH 3,48, ATT = 6,6 %, cinzas 78,54 % e umidade 85,16 em Palmeiras, demonstrando uma maior diluição na amostra do município de Palmeiras. Segundo a análise dos compostos voláteis por HS-SPME em aparelho de GC-MS foi possível identificar alguns componentes com propriedades nutricionais e medicinais como: os ácidos graxos cáprico e esteárico nas amostras de Filadélfia e Palmeiras respectivamente, o α -cariofileno nas duas amostras e o linalol na amostra de Palmeiras. Também foram identificados os ácidos butírico e isobutírico que são compostos derivados de reações de degradação das amostras nos dois locais de coleta. Apesar desses contaminantes salientamos que o consumo das polpas são viáveis e apresentam importante papel na sociedade como fonte de renda dos produtores e para melhoria na qualidade de vida dos consumidores.

Agradecimentos

Ao Laboratório LabCrom do campus de Araguaína da UFT.

Referências

1. Albuquerque, M. L. S. et al., Journal of the Brazilian Chemical Society, 2005, v. 16, n. 6A, p.1113.
2. Canuto, G.A.B., Xavier, A.A.O., Neves, L.C., Benassi, M.T., Revista Brasileira de Fruticultura, Jaboticabal - SP, 2010, v. 32, n. 4, p.1196.
3. De Oliveira, A. I. T. et al., Journal of Medicinal Plants Research, 2017, v. 11, n. 40, p. 635.
4. Instituto Adolfo Lutz. Normas analíticas do Instituto Adolfo Lutz: métodos químicos e físicos para análises de alimentos. 4ª ed. São Paulo, 1º Ed. digital, 2008, p. 100p.

Estudo do óxido de grafite como catalisador nas reações dos benzimidazóis 1,2-dissubstituídos

Raquel F. Naves^{1,2*} (PG), Guilherme R. de Oliveira² (PQ), Christian G. Alonso² (PQ), Paulo R. Martins² (PQ). E-mail: raquelfnaves@hotmail.com

¹ Instituto Federal de Goiás, Campus Inhumas, Av. Universitária, Inhumas - GO, 75402-556, Brasil

² Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Campus Samambaia CP 131 CEP 74001-970, Brasil

Palavras-chave: óxido de grafite, catalisador, benzoimidazol.

Os benzimidazóis 1,2-dissubstituídos são uma importante classe de compostos contendo nitrogênio, o qual apresentam diversas propriedades biológicas e farmacológicas. O núcleo do benzimidazol é conhecido por serem agentes antialérgico, anti-histamínico, anti-ulcerativo, anti-hipertensivo, antipirético e entre outros.¹ A preparação tradicional de benzimidazóis geralmente envolve condições adversas, como ácidos fortes e alta temperatura.² Assim, testou-se o óxido de grafite como catalisador nas reações para obtenção dos benzoimidazóis 1,2-dissubstituídos pois devido ao seu caráter ácido, fácil reutilização, estrutura altamente porosa e área superficial elevada, o torna um excelente catalisador heterogêneo, ecologicamente correto. O óxido de grafite é caracterizado como folhas de grafite com regiões aromáticas distribuídas aleatoriamente (átomos de carbono sp^2) e regiões alifáticas oxigenadas (átomos de carbono sp^3), apresentando diferentes grupos funcionais como hidroxila, epóxi e grupos carboxílicos, o qual confere um caráter ácido ao material.³ Para a obtenção do óxido de grafite empregou-se o método Hummer's, o qual o grafite é oxidado envolvendo uma mistura de nitrato de sódio, permanganato de potássio e ácido sulfúrico concentrado, porém a metodologia é um processo demorado e de baixo rendimento.⁴ O espectro de difração de raio-x do grafite apresentou um pico em $2\theta=26,8^\circ$, enquanto o óxido de grafite apresentou um pico em $2\theta=11,2^\circ$, assim essa diminuição na intensidade é utilizada para avaliar o processo de oxidação, o qual comprovou-se que o tratamento com ácido proporcionou aumento entre as lamelas de grafite, com valores muito próximos aos apresentados na literatura. Neste estudo, o núcleo do benzimidazol foi obtido pela reação do o-fenilenodiamina com benzaldeído sob condições diferentes, o qual avaliou-se a atividade catalítica do óxido de grafite. A reação foi estudada variando os parâmetros, como temperatura, razão estequiométrica, solventes e a quantidade de catalisador. Desse modo, avaliou-se as melhores condições reacionais as quais permitiram rendimentos acima de 85% e com excelentes tempos reacionais, possibilitando que a reação fosse testada em outros substratos. Todos os produtos foram caracterizados por RMN 1H e ^{13}C e foram identificados pela comparação dos espectros relatados na literatura.

Agradecimentos

FAPEG – Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Goiás

Referências

1. Das, K., Mondal, A. & Srimani, D. *Journal of Organic Chemistry*, 2018, 83, 9553.
2. Yu, H., Zhang, M. S. & Cui, L. R. *Chinese Chemical Letters*, 2012, 23, 573.
3. Georgakilas, V. *et al.* *Chemical Reviews*, 2012, 112, 6156.
4. Moo, J. *et al.* *Chemphyschem*, 2014, 15, 2922.

Estudo Químico de *Lomatozona artemisiifolia* Baker e comparação de suas espécies nativa e *in vitro* através de análises de CLAE-EM/EM e quimiometria

Lorant M. Abreu¹ (IC), Vinícius G. Wakui¹ (PG), Ana P. Terezan^{1,2} (PQ), Cecília M. A. de Oliveira^{1,2} (PQ), Luiz H. Q. Júnior³ (PQ), Sérgio T. Sibov⁴ (PQ) e Lucília Kato¹ (PQ)

1. Laboratório de Produtos Naturais e Síntese Orgânica, Instituto de Química, UFG

2. Centro Regional para o Desenvolvimento Tecnológico e Inovação, UFG

3. Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear, Instituto de Química, UFG

4. Laboratório de Cultura de Tecidos, Escola de Agronomia, UFG

Av. Esperança, s/n, Bloco IQ-1, Laboratório 105, Campus Samambaia, Goiânia-GO
lorrant.m@ufg.br

Palavras-chave: flavonoides metoxilados, diterpenos labdanos, *Lomatozona artemisiifolia*, Asteraceae.

A espécie *Lomatozona artemisiifolia* Baker é endêmica do estado de Goiás e pertence à família Asteraceae. Recentemente, esta espécie foi incluída na lista vermelha de flora brasileira ameaçada de extinção¹ e, visando sua conservação no bioma Cerrado, foi realizado um estudo de cultivo e micropropagação *in vitro*.

As partes aéreas de *L. artemisiifolia* foram coletadas no Parque Estadual da Serra Dourada (Mossâmedes, GO) e identificadas pelo botânico prof. Dr. Aristônio M. Teles (ICB, UFG). Em seguida, o material vegetal foi submetido à uma extração², fornecendo os extratos EA1, EA2 e EE, provenientes de plantas coletadas nas estações seca, chuvosa e da planta *in vitro*. Também foi preparado um extrato hexânico a partir do extrato EA1, através da extração com n-hexano. O extrato EA1 foi submetido à sucessivas purificações em colunas cromatográficas levando ao isolamento e identificação dos compostos acetil-8,15-labdanodiol (1), quercetagentina-3,5,6,3',4'-pentametil éter (2), oxianina B (3), 8,15-labdanodiol (4), crisplenetina (5) e paquipodol (6). O mesmo procedimento foi adotado com o extrato hexânico, do qual foi isolado o composto ácido 8-hidroxi-15-labdanóico (7). Em seguida todos os extratos foram analisados através de CLAE-EM/EM, cujos dados foram submetidos a uma análise de rede molecular usando-se a plataforma GNPS, permitindo-se a anotação de flavonoides metoxilados e também diterpenos labdanos. Por fim os dados de CLAE-EM também foram analisados por quimiometria, usando-se as análises hierárquica de cluster (HCA) e de componentes principais (PCA), com o objetivo de se observar os agrupamentos dos extratos de perfil químico similar. Na HCA observou-se a formação de dois grupos, um com os extratos EA1 e outro com os demais extratos (EA2 e EE) e na PCA observou-se que os extratos EA1 da planta nativa são diferentes da espécie *in vitro*.

Agradecimentos

Ao CRTI pelas análises de CLAE-EM/EM e aos órgãos de fomento FAPEQ, CNPQ e CAPES pelo apoio.

Referências

1. Nakajima, J. N.; *et al.* Comparative analysis of red lists of Brazilian flora: Asteraceae. *Rodriguésia* 2012, 63, 39-54.
2. Kato, L.; *et al.* Study of the *in situ* and *in vitro* *Lomatozona artemisiifolia* Baker (Asteraceae) through LC-MS/MS analysis. 41a RASBQ 2018.
3. Wang, M.; *et al.* Sharing and community curation of mass spectrometry data with Global Natural Products Social Molecular Networking. *Nature Biotechnology* 2016, 34 (8), 828-837.

Identificação de novos *hits* potenciais contra NS5 de Zika através de abordagens de similaridade, *docking* e modelos de aprendizado de máquina

Paulo R.P.S. Ramos¹ (IC), Melina Mottin¹ (PQ), Bruna K.P. Sousa¹ (PG), Daniel H. Foil² (PQ), Kimberley M. Zorn² (PQ), Sean Ekins² (PQ), Carolina H. Andrade¹ (PQ) *pauloricd96@gmail.com*.

1 - LabMol – Laboratório de Planejamento de Fármacos e Modelagem Molecular, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil

2 - Collaborations Pharmaceuticals, Inc., Raleigh, NC, USA.

Palavras-chave: Zika vírus, Dengue vírus, NS5, *docking molecular*, antivirais.

O vírus Zika (ZIKV), transmitido pelo mosquito *Aedes aegypti* em países de clima tropical e subtropical,¹ causou epidemias em vários locais do mundo, devido a sua rápida disseminação e vários modos de transmissão que incluem sangue, sêmen e leite materno². Apesar de suas graves consequências principalmente neurológicas², ainda não há antivirais para combater a infecção. A proteína NS5, composta pelos domínios metiltransferase (MTase) e RNA polimerase (RdRP), tem um papel essencial na síntese e estabilidade do RNA viral³ e consequentemente, é um alvo promissor para o desenvolvimento de novos fármacos. Neste trabalho, realizamos uma análise de similaridade sequencial dos sítios ativos das proteínas NS5 de dengue (DENV) e de ZIKV e observamos uma alta conservação dos resíduos. A partir disso, buscamos por inibidores da proteína NS5 de DENV nas bases de dados PubChem e ChEMBL, para guiar a triagem de inibidores de NS5 de ZIKV. Foram encontrados 145 compostos relatados na literatura como inibidores de NS5 de DENV. Realizamos a triagem desses compostos através de um filtro fenotípico de aprendizado de máquina (ML, *Machine Learning*) de ZIKV. Dos 145 compostos, 74 foram preditos como ativos e foram submetidos à cálculos de *docking molecular* para os sítios ativos de MTase e RdRP de NS5 de ZIKV. Dos 74 compostos, 32 apresentaram bons resultados nos dockings e foram selecionados como *hits* virtuais. Posteriormente, foi realizada uma busca por similaridade aos *hits* virtuais em bancos de dados comerciais (eMolecules) e as etapas de ML e *docking molecular* foram realizadas novamente com os compostos similares. Os 32 *hits* apresentaram 4.953 compostos similares. Após passarem pelo filtro de ML, 1.802 compostos foram preditos como ativos. O *docking molecular* desses compostos permitiu a seleção de um total de 176 compostos para a NS5 de ZIKV. Ao final, esses compostos foram triados através de modelos bayesianos de ML de ZIKV e citotoxicidade, que resultou em uma lista com 58 compostos promissores. Estes compostos serão adquiridos e validados por ensaios enzimáticos *in vitro* e em ensaios celulares para avaliar a atividade antiviral contra ZIKV.

Agradecimentos

UFG, FAPEG, CNPQ, LabMol, Collaborations Pharmaceuticals.

Referências

1. Mottin, M., Borba, J. V. V. B., Braga, R. C., Torres, P. H. M., Martini, M. C., Proenca-modena, J. L., Judice, C. C., Costa, F. T. M., Ekins, S., Perryman, A. L., *Drug Discov Today*, 2018, v. 23, p. 1833
2. Rodriguez-Morales, A. J., Bandeira, A. C., Franco-Paredes, C. *Ann Clin Microb Anti*, 2016, v.15.
3. Zhao, B., Yi, G., Du, F., Chuang, Y., Vaughan, R. C., Sankaran, B., Kao, C. C., Li, P. *Nat Commun*, 2017, v.8, p. 1.

INFLUÊNCIA DE DIFERENTES TIPOS DE ÁGUA E TEMPERATURAS NA TURBIDEZ DE CACHAÇAS DE ALAMBIQUE

Karla C. R. C. Morais (PG)^{1,*}, Elaine Carvalho Pinto (PQ)², Eliane Santana Fernandes (PQ)³, Luciano Morais Lião (PQ)³. *e-mail: karlagropan@hotmail.com*

¹ Escola de Agronomia, Programa de pós-graduação em Ciência e Tecnologia e Alimentos - UFG, CEP 74690-900, Goiânia, GO; ² Serviço nacional de aprendizagem industrial – SENAI, Escola Senai vila Canaã, Rua Professor Lázaro Costa, nº 348, Vila Canaã, CEP 74415-420, Goiânia, GO, ³ Instituto de Química – UFG, CEP 74690-900, Goiânia, GO.

Palavras-chave: turbidez, cachaça, padronização, água destilada, água desmineralizada.

Cachaça é a denominação típica e exclusiva de aguardente de cana produzida no Brasil, com graduação alcoólica de 38% a 48% em volume a 20 °C, adquirido pela destilação do mosto de cana-de-açúcar, possuindo características peculiares¹. As etapas de produção da cachaça são basicamente: Moagem da cana-de-açúcar; Decantação; Fermentação; Destilação e envase. Antes de serem envasadas a bebida passa pela etapa de padronização, que consiste em utilizar água potável para corrigir a graduação alcoólica do produto final. No entanto esta etapa pode causar turbidez indesejável, comumente referida como neblina ou nebulosidade pouco tempo após a adição da água ou durante o armazenamento. A fim de minimizar essa problemática muitos produtores fazem o uso de filtros de celulose para reduzir as partículas em suspensão e a turbidez da cachaça, porém muitas vezes esta não é uma medida eficiente e fatores como a qualidade e características físico-químicas da água podem contribuir com a presença de turbidez na bebida padronizada². Desta forma o objetivo desse trabalho foi avaliar a influência de diferentes tipos de água e temperaturas durante a padronização da cachaça e avaliar os feitos na turbidez da bebida durante 90 dias de armazenamento. A cachaça utilizada no experimento corresponde a fração coração com 60 °GL e esta foi padronizada para 40 °GL com uso de água destilada e água desmineralizada com posterior filtração através de folha de filtro qualitativo com uma taxa de retenção nominal de 4 -12 µm, assumido os seguintes tratamentos: A (água destilada à 10 °C); B (água desmineralizada à 10 °C); C (água destilada à temperatura ambiente); D (água desmineralizada à temperatura ambiente); E (água destilada à 40 °C) e F (água desmineralizada à 40 °C). As análises de turbidez foram realizadas em triplicatas após a padronização e filtração nos períodos de 1 hora, 15 dias e 90 dias sob temperatura ambiente. Os resultados das análises de turbidez demonstram que a cachaça padronizada com água desmineralizada à 10 °C obteve um menor valor de turbidez (0,11 UT) após 90 dias de armazenamento em temperatura ambiente. Provavelmente a redução da temperatura acelerou a formação de turbidez, que foi eliminada por filtração, garantindo assim a estabilidade físico-química da bebida durante o período de armazenamento. Além disso a água desmineralizada tem como características menores teores de íons positivos e conseqüentemente uma menor formação de colides³.

Agradecimentos: CAPES - Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior

Referências

1. BRASIL. MAPA. Instrução Normativa nº 24 de 8 de setembro de 2005.
2. BRÜNING A. Application report: filtration solutions for spirits processing. Langenlonsheim, Germany, 2018.
3. BALCEREK, M.; PIELECH-PRZYBYLSKA, K.; DZIEKON'SKA-KUBCZAK, U.; PATELSKI, P.; ROZANSKI, M. Effect of filtration on elimination of turbidity and changes in volatile compounds concentrations in plum distillates. J. Food Sci Technol. v. 56 n. 4 p. 2049 – 2062. 2019.

Integração de estratégias de *docking*, modelos de aprendizado de máquina e avaliação experimental para identificar novos inibidores da glicoproteína de envelope do vírus Zika

Melina Mottin^{1*} (PQ), Ana Puhl Rubio² (PQ), Daniel Foil² (PQ), Sean Ekins² (PQ), Carolina Horta Andrade¹ (PQ)

melinamottin@gmail.com

¹ LabMol - Laboratory of Molecular Modeling and Drug Design, Faculdade de Farmácia, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, GO, 74605-170, Brazil.

² Collaborations Pharmaceuticals, Inc., Raleigh, NC, United States

Palavras-chave: vírus Zika, proteína de envelope, *docking*, modelos de aprendizado de máquina

O vírus Zika (ZIKV) é um flavivírus de origem africana que se disseminou rapidamente em vários países, causando uma emergência global em 2016¹. As consequências mais graves e preocupantes da doença estão relacionadas a danos no sistema neurológico, causando microcefalia e síndrome de Guillain Barré². Até o momento, não foram descobertos antivirais para tratar a infecção. A glicoproteína de envelope (E) é responsável pela entrada do vírus na célula e representa um dos principais sítios de ligação a anticorpos, sendo um alvo promissor para pesquisa e desenvolvimento de fármacos³. Esta proteína é composta por três domínios: domínio *β-barrel-shaped* (DI), domínio *finger-like* (DII), responsável pela dimerização e domínio *immunoglobulin-like* (DIII), responsável pela ligação à anticorpos³. Neste estudo, realizamos uma triagem virtual da quimioteca ChemBridge, que contém aproximadamente 1 milhão de compostos, contra a proteína E de ZIKV. Inicialmente, realizou-se a predição dos sítios de ligação, pois esses não são descritos na literatura. Foram utilizados os servidores FTsite (<https://ftsitesite.bu.edu/>) e PockDrug (<http://pockdrug.rpbs.univ-paris-diderot.fr/cgi-bin/index.py?page=Druggability>) para prever os sítios mais prováveis de ligação à fármacos. Foram identificados dois sítios: um entre os domínios DI-DIII e outro na interface de dimerização. A triagem virtual baseada em *docking* no sítio DI-DIII priorizou 1.361 compostos, que apresentaram energia de afinidade de ligação ≤ -7.0 kcal/mol. Posteriormente, um modelo de aprendizado de máquina (AM) fenotípico para predição de compostos ativos foi utilizado como filtro, que priorizou 43 compostos como potencialmente ativos contra ZIKV. Foram utilizados também modelos AM bayesianos de Zika, filtros de PAINS, permeabilidade à barreira hematoencefálica e inspeção visual das poses de *docking*, priorizando um total de sete *hits* virtuais para aquisição e avaliação experimental. Ensaios biofísicos e enzimáticos foram realizados e dois compostos inibiram atividade da proteína E de ZIKV com potência em escala nanomolar. Futuramente, ensaios em células infectadas com ZIKV serão realizados para avaliar a atividade antiviral desses compostos.

Agradecimentos

CNPq, FAPEG, Collaborations Pharmaceuticals, IBM, *World Community Grid*.

Referências

1. Mottin, M.; Borba, J. V. V. B., Braga, R. C., *et al*, Drug Discov Today, 2018, 23, 1833
2. Rodriguez-Morales, A. J., Bandeira, A. C., Franco-Paredes, C. Ann. Clin. Microb. Anti, 2016, 15, 1685.
3. Dai, L., Song, J., Lu, X., *et al.*, Cell Host Microbe, 2016, 19,115.

Modelos baseados na forma e volume molecular e de aprendizado de máquina para a identificação de inibidores de aurora cinase 2 de *Plasmodium* sp.

Sabrina S. Mendonça (PG),^{1*} Joyce V. V. B. Borba (PQ),^{1,2} Richard Eastman (PQ),³ Juliana C. Paim (PG),⁴ Daniel Y. Bargieri (PQ)⁴ e Carolina H. Andrade (PQ)^{1,2}.

E-mail: sabrinamendonca@discente.ufg.br

¹Laboratório de Planejamento de Fármacos e Modelagem Molecular – LabMol, Faculdade de Farmácia, Universidade Federal de Goiás; ²Laboratório de Doenças Tropicais, Departamento de Genética, Evolução, Imunologia e Microbiologia, Instituto de Biologia, Universidade Federal de Campinas; ³Division of Preclinical Innovation, National Center for Advancing Translational Sciences, National Institutes of Health, Rockville, Maryland, USA; ⁴Laboratório de Genética Molecular, Departamento de Parasitologia, Instituto de Ciências Biomédicas, Universidade de São Paulo.

Palavras-chave: Químioinformática, Inteligência Artificial, Aurora cinase, Triagem virtual, Malária.

A malária é uma doença que atingiu 228 milhões de pessoas no mundo em 2018¹, sendo imprescindível a busca por novos antimaláricos com novos mecanismos de ação, objetivando tanto a inibição do parasita no hospedeiro como também o bloqueio da transmissão pelo vetor². Nesse trabalho, foram construídos modelos computacionais baseados na forma e volume moleculares (do inglês, *shape-based*) de inibidores da proteína aurora cinase 2 de *Plasmodium falciparum* (PfARK2) e modelos de aprendizado de máquina para a predição de compostos inibidores da fertilização. Os modelos *shape based* foram gerados a partir de dados da patente (US 2019 / 0077768 A1) com inibidores de PfARK2 de *P. falciparum*. O melhor modelo apresentou boas métricas de validação (AUC de 87%, EF de 6,71, CCR de 72% e BEDROC de 51%) para os primeiros 10% da lista ordenada de compostos de validação. Os modelos de aprendizado de máquina foram gerados com dados experimentais de *high throughput screening* (HTS) de compostos inibidores e não inibidores da formação do oocineto (fertilização) em *P. berghei*, sendo compilados e curados conforme boas práticas de QSAR^{3,4}. Os modelos gerados apresentaram boas métricas de validação, sendo que o melhor modelo obtido foi com o descritor Torsion e apresentou acurácia de 90%, taxa de classificação correta de 82%, especificidade de 84% e cobertura de 87%. Finalmente, foi realizada uma triagem virtual do banco de dados de compostos comerciais com propriedades *drug-like* (Enamine), sendo utilizados quatro filtros na triagem: um filtro com o modelos *shape based* de compostos testados contra a proteína PfARK2, o segundo filtro modelos de QSAR-aprendizado de máquina *in house* para atividade contra as cepas de *Plasmodium falciparum* i) 3D7 (sensível) e ii) W2 (resistente), construídos anteriormente no laboratório⁵, e, o terceiro filtro com o modelo de fertilização. Após a triagem, foram obtidos 30 hits virtuais com potencial atividade antimalárica e de bloqueio da transmissão, que serão submetidos a validação experimental.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, pela oportunidade de cursar de mestrado, com bolsa - RN-017/2006 e FAPESP.

Referências

1. World Health Organization, 2019, acesso em 4 de fevereiro de 2020.
2. Calit, J. et al., Antimicrobial agents and chemotherapy, 2018, 62, 1.
3. Fourches, D., Muratov, E. e Tropsha, A. Journal of chemical information and modeling, 2016, 56, 1243.
4. OECD, 2004, disponível em: <<http://www.oecd.org/chemicalsafety/risk-assessment/37849783.pdf>>.
5. Lima, M. N. N. et al. Frontiers in pharmacology, 2018, 9, 47.

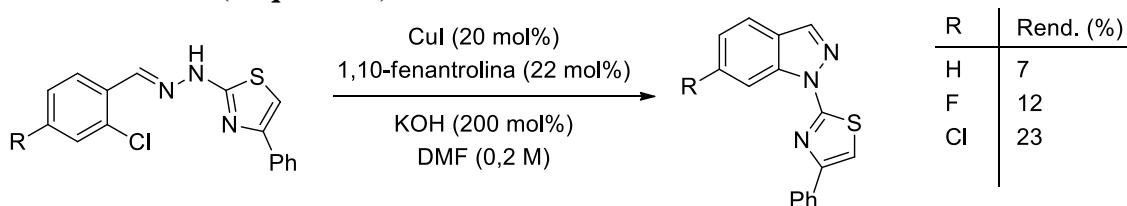
***N*-Arilação intramolecular de hidrazonas tiazolil substituídas para a síntese de 1*H*-indazóis catalisada por cobre**

Yara C. M. Barbosa¹ (PG), Bianca S. Rocha¹ (IC), Lucas Pizzuti¹ (PQ).
biancarochasouza20@gmail.com.

¹GP em Síntese e Caracterização Molecular do MS, UFGD/FACET, Dourados, MS, Brasil.

Palavras-chave: catálise por cobre, tiazol, 1*H*-indazol, *N*-arilação.

Os indazóis são compostos heterocíclicos nitrogenados, que pertencem à classe dos azóis e são anéis de cinco membros condensados com um benzeno, o que permite a funcionalização em diferentes posições. Estes compostos, por sua vez possuem grande importância e utilidade principalmente por suas atividades farmacológicas. O método sintético comumente utilizado para a preparação de indazóis consiste na reação de 2-halobenzaldeídos e 2-haloacetofenonas com hidrazinas, buscando formar hidrazonas *in situ* ou isoladas, as quais podem ser ciclizadas cataliticamente, por meio de uma *N*-arilação intramolecular. No entanto, os trabalhos já desenvolvidos não trazem detalhes do efeito de diferentes catalisadores de cobre, ligantes, bases e solventes. Assim, o objetivo do presente estudo é sintetizar 1*H*-indazóis inéditos através da *N*-arilação intramolecular catalisada por cobre de hidrazonas tiazolil substituídas nunca exploradas nessa reação, derivadas de 2-clorobenzaldeídos. Para a síntese da série de hidrazonas tiazolil substituídas, empregou-se um método descrito na literatura¹ para promover a reação entre tiossemicarbazida, 2-bromoacetofenona e os benzaldeídos substituídos, fornecendo as hidrazonas desejadas com 83-97% de rendimento. Embasado nos procedimentos descritos na literatura^{2,3} foi proposta uma condição de reação inicial, a partir da qual foram avaliados os parâmetros de solvente, base, ligante e tempo. Após a realização de algumas reações com diferentes combinações destes, foi possível constatar que a condição que gerou melhor rendimento e formação de novos indazóis, foi utilizando de CuI (20 mol%), 1,10-fenantrolina (22 mol%) e KOH (200 mol%) em DMF por 24 horas, em atmosfera inerte (**Esquema 1**).



Esquema 1

A confirmação estrutural dos produtos da série se deu através da análise dos espectros de massas de alta resolução e da ressonância magnética nuclear de ¹H e ¹³C. A condição determinada forneceu rendimentos relativamente baixos, embora os produtos sejam inéditos. O escopo da reação será avaliado para outros substituintes em diferentes posições e a condição será otimizada com o objetivo de melhorar os rendimentos.

Agradecimentos

UFGD, CNPq e Capes.

Referências

- ¹ Zhanga, D. N., Lia, J. T., Songc, Y. L., Liu, H. M., Li, H. Y. *Ultrason. Sonochem.* **2012**, 19, 475–478.
- ² Lee, H. K., Cho, C. S. *Synth. Commun.* **2013**, 43, 915-921.
- ³ Liu, R., Zhu, Y., Qin, L., Ji, S. *Synth. Commun.* **2008**, 38, 249-254.

Novos horizontes da espectrometria de massas de ressonância ciclôtrica de íons com transformada de Fourier (FT-ICR MS): comparativo da detecção dipolar e quadrupolar

Danielle M. M. Franco¹(PG), Jeferson A. V. Dávila¹(PQ), Taynara R. Covas¹(PG), Talita P. de Brito¹(PG); Boniek G. Vaz¹(PQ). *danmitze@gmail*.

¹Universidade Federal de Goiás.

Palavras-chave: Espectrometria de Massas, FT ICR MS, detecção quadrupolar 2 ω .

Espectros de massas em FT-ICR MS não mostram apenas os picos de massas das frequências ciclôtricas fundamentais n^+ (detecção dipolar 1ω) ou $2n^+$ (detecção dipolar 2ω). No caso de um movimento ciclôtrico, perfeitamente centrado na cela, picos de elevadas frequências harmônicas, oriundos das frequências fundamentais, sempre aparecem como resultado do processamento da transformada de Fourier (FFT). Em experimentos reais, os íons não executam um movimento perfeitamente ciclôtrico na cela de ICR. Usualmente, eles rotacionam em órbitas que são uma superposição do movimento ciclôtrico com frequência n^+ (detecção dipolar 1ω) ou $2n^+$ (detecção dipolar 2ω) e do movimento magnetrônico com frequência n^- , $2n^-$, respectivamente. O movimento magnetrônico usualmente surge devido a uma injeção de íons fora do eixo na cela de ICR. Ele também pode ser gerado ou aumentado durante o evento de excitação por um campo dipolar RF não homogêneo. O centro do movimento magnetrônico também pode ser deslocado do centro geométrico da cela de ICR. Isto ocorre quando o centro do campo elétrico aprisionador não é igual ao centro geométrico da cela de ICR.^{1,2}

Com o objetivo de otimizar a performance da cela do FT-ICR, particularmente a cela ICR dinamicamente harmonizada (ParaCell), o movimento magnetrônico deve ser minimizado e centrado. Desse modo, para alcançar espectros com ótima performance de resolução e exatidão de massas, um procedimento denominado *Shimming* deve ser executado. Nesse procedimento, parâmetros instrumentais são ajustados para reduzir ou eliminar completamente o movimento magnetrônico, além de centralizar os íons no eixo geométrico da cela de ICR, em caso de distorções no potencial elétrico aprisionador.²

Alterando-se vários parâmetros da cela de ICR, desenvolveu-se um método para a detecção dipolar (1ω) e um método para detecção quadrupolar (2ω). Para o modo de detecção 1ω , tem-se apenas dois pratos de detecção, e o transiente dos íons na cela de ICR apresentou-se uma duração de seis segundos. Por outro lado, para o modo de detecção 2ω , com quatro pratos de detecção, o transiente dos íons na cela de ICR apresentou-se com uma duração de cerca de três segundos. Em ambos os modos de aquisição, para o íon de m/z 400,00 obteve-se um poder de resolução de 800.000,00. No entanto, a diferença consiste que para o modo 1ω , o tempo de aquisição foi de aproximadamente 15 min, enquanto que para o 2ω , o tempo de aquisição foi de 6 min, ou seja, um pouco menos que a metade do tempo de aquisição do modo 1ω , alcançando um novo patamar, horizonte, em espectrometria de massas. Cabe salientar que com futuros ajustes, o método desenvolvido poderá levar a aquisição de espectros com vários milhares de poder de resolução em minutos, experimentos que outrora demandavam horas.

Agradecimentos

Ao Instituto de Química da UFG pelo apoio e a Petrobras pelo financiamento.

Referências

¹Nikolaev, E. N., *et al*, J. Am. Soc Mass Spectrom, 2011, 22, 1125–1133.

²Jertz, R., *et al.*, Bruker Daltonics, 2016. 08 PN-34, 1845958.

Proposta sintética para Guanilação de Tioureias

Anna P. S. Romão¹ (PG), Maísa B. Costa¹ (PQ). apsromao@yahoo.com

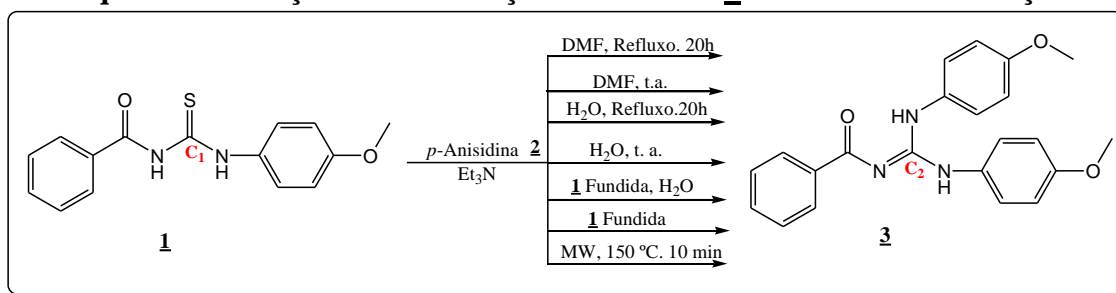
¹ Universidade Estadual de Goiás – Câmpus de Ciências Exatas e Tecnológicas.

Palavras-chave: Guanidinas, Síntese, Agentes Tiofílicos.

Largamente utilizadas como precursores de reações orgânicas, as tioureias tem vários empregos em sínteses de compostos orgânicos com potencial biológico. Na síntese apresentada neste estudo, a tioureia **1** foi empregada como reagente principal para a produção de guanidinas, sem o emprego de agentes tiofílicos, tais como mercúrio, bismuto, cobre, com o intuito de diminuir a toxicidade do processo reacional.

O esquema abaixo representa de modo simplificado a reação de guanilação da tioureia nas reações testadas.

Esquema 1 - Reações de Guanilação da Tioureia **1** sob diferentes condições



As reações foram acompanhadas por CCD (hexano/acetato de etila 20%) e submetidas à espectroscopia de RMN (¹H e ¹³C) para caracterização do produto **3**. Dentre as metodologias testadas, as reações feitas à temperatura ambiente, não apresentaram formação de produto. As reações feitas em refluxo e com a tioureia fundida apresentaram formação do produto **3**, bem como as reações feitas em micro-ondas. A confirmação estrutural de **3** ocorreu a partir da análise espectroscópica por RMN ¹H e ¹³C, com ênfase para o RMN de ¹³C que mostra o pico referente ao carbono C2 em 156.78 ppm, além da ausência do pico referente ao carbono C1 em 179.8 ppm. Entretanto, as reações realizadas em micro-ondas apresentaram um tempo curto, de 10 minutos, enquanto as reações realizadas em refluxo, apresentaram um tempo de reação de aproximadamente 20 horas, que se mostrou mais viável o uso do micro-ondas para este processo sintético.

Agradecimentos

Ao CCET/UEG pelos recursos oferecidos para a pesquisa e ao PPGQ-Ciências Moleculares.

Referências

1. CUNHA, S. D.; COSTA, M. B.; NAPOLITANO, H. B.; LARIUCCI, C.; VENCATO, I., *Tetrahedron*, 2001, V. 57, p. 1671.

PROSPECÇÃO QUÍMICA DAS FLORES DE *Pterodon pubescens*

Alline M. Ribeiro^{1*} (PG), Adriane da Silveira Gomes²(PQ), Richele P. Severino¹(PQ), Lorena R. F. de Sousa¹ (PQ)

*allinekeka@hotmail.com

¹Universidade Federal de Goiás – Regional Catalão, Av. Dr. Lamartine P. Avelar, Catalão – GO

²Instituto Federal Goiano-Campus Iporá, Av. Oeste, 350 - Parque União, Iporá - GO

Palavras-chave: Leishmania, sucupira, estudo químico.

A *Pterodon pubescens* Benth. (Fabaceae) é conhecida popularmente como sucupira-branca, uma planta do cerrado usada como planta medicinal, destacando o seu uso para tratamentos antirreumáticos, analgésicos e anti-inflamatórios¹. Há alguns relatos do estudo químico das folhas e cascas do caule, porém ainda não existe nenhum estudo químico das flores². Neste contexto, este trabalho teve como objetivo realizar a prospecção química das flores de *Pterodon pubescens*.

As flores de *P. pubescens* foram coletadas no cerrado de Catalão-GO em agosto de 2016 e sua exsicata está armazenada no herbário da UnB, Herbário da Universidade de Brasília (UB) (UB 217074). As flores frescas foram submetidas a macerações utilizando álcool etílico. Após a concentração em rotaevaporador à 40°C o extrato etanólico obtido foi 41,6 g e submetido à partição líquido-líquido com hexano (15,4 g), acetato de etila (16,4 g) e por fim obtido a partição hidroalcoólica (9,8g). A análise do extrato etanólico foi realizada utilizando a técnica analítica hifenada de Cromatografia Líquida de Ultra-eficiência e espectrometria de massas de alta resolução de CLUE-ESI-QqTOF-EM/EM e a fração hexânica foi analisada pela técnica de cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas, CG-EM.

Foi possível identificar por CLUE-ESI-QqTOF-EM/EM quatro compostos presentes no extrato etanólico de acordo com os espectros de massas obtidos para cada composto. Os compostos obtidos foram: rutina, quercetina-*O*-rhamnopiranosídeo, catequina ou epicatequina, quercetina. Através da CG-EM foi identificado onze compostos que fazem parte da classe dos terpenoides que de acordo com a literatura³ estão presentes em outras partes da planta como por exemplo, nas folhas, casca do caule, fruto. Os compostos identificados foram: β -copaeno, (z)-jasmone, β -cariofileno, α -humuleno, aromandendreno, muuroleno, γ -cadineno, β -cadineno, óxido de cariofileno, α -cadinol e β -guaieno.

Os resultados obtidos contribuem com o conhecimento químico do gênero *Pterodon* e com a espécie *P. pubescens* estudada tendo em vista que as flores não haviam sido investigadas anteriormente. Dentro das perspectivas futuras as frações obtidas da partição líquido-líquido estão sendo investigadas através de fracionamento por técnicas cromatográficas e isolamento dos compostos para futuras investigações biológicas.

Agradecimentos: CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil), código financeiro 001.

Referências

- 1.MARTINS, G.A.S. & LIMA, M.D. Rev. Encic. Bio., 2013, v.9, p.2556.
- 2.BASANO, S.A. & CAMARGO, L.M.A. Rev. Brasileira de Epid., 2004, v.7, p.1.
- 3.MIRANDA, M. L. D.; GARCEZ, F.R.; ABOT, A.R.; GARCEZ, W.S. Rev. Quim. Nova, 2014, v.37, p.473.

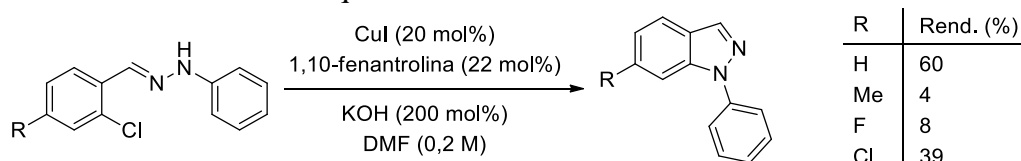
Síntese de 1*H*-indazóis através da ciclização intramolecular de fenilhidrazonas catalisada por cobre

Yara C. M. Barbosa¹ (PG), Yasmin L. Santos¹ (IC), Lucas Pizzuti¹ (PQ).
yasmin.ls2019@gmail.com

¹GP em Síntese e Caracterização Molecular do MS, UFGD/FACET, Dourados, MS, Brasil.

Palavras-chave: catálise por cobre, 1*H*-indazol, *N*-arilação.

Os compostos heterocíclicos nitrogenados possuem grande importância e utilidade principalmente por suas atividades farmacológicas. Os indazóis pertencem à classe dos azóis e são anéis de cinco membros condensados com um benzeno, o que permite a funcionalização em diferentes posições. O método sintético comumente utilizado para a preparação de indazóis consiste na reação de 2-halobenzaldeídos e 2-haloacetofenonas com hidrazinas, buscando formar hidrazonas *in situ* ou isoladas, as quais podem ser ciclizadas cataliticamente, por meio de uma *N*-arilação intramolecular. No entanto, os trabalhos já desenvolvidos não trazem detalhes do efeito de diferentes catalisadores de cobre, ligantes, bases e solventes. Assim, o objetivo do presente estudo é sintetizar 1*H*-indazóis pela *N*-arilação intramolecular de hidrazonas isoladas derivadas de 2-halobenzaldeídos catalisada por cobre. Para a síntese da série de hidrazonas fenil substituídas, empregou-se um método descrito na literatura¹ para promover a reação entre a fenilhidrazina e os benzaldeídos substituídos na presença de ácido acético (20 mol%), acetato de sódio (20 mol%) e metanol, resultando no produto desejado com 83% à 96%. Embasado pelos resultados e procedimentos descritos na literatura^{2,3} foi proposta uma condição de reação inicial, a partir da qual os parâmetros solvente, base, ligante e tempo foram avaliados. Após a otimização da condição, o melhor rendimento do indazol foi obtido quando utilizado CuI (20 mol%), 1,10-fenantrolina (22 mol%) e KOH (200 mol%) em DMF por 24 horas, em atmosfera inerte (**Esquema 1**). Esta condição foi empregada para a obtenção de uma série de indazóis com diferentes substituintes em rendimentos que variaram de 4% à 60%.



Esquema 1

A confirmação estrutural dos produtos foi realizada por espectrometria de massas de alta resolução e ressonância magnética nuclear de ¹H e ¹³C. Em suma, a melhor condição determinada utilizou material de partida (2-clorobenzaldeídos substituídos) e base mais baratos e proporcionou rendimentos comparáveis aos da literatura, quando hidrazonas mais reativas, derivadas do 2-bromobenzaldeído, foram ciclizadas.

Agradecimentos

UFGD, CNPq e Capes.

Referências

- ¹Dimmock, J. R., Sidhul, K. K., Tumberl, S. D., Basranl, S. K., Chenl, M., Quail, J. W., Yang, J., Rozas, I., Weaver, D. F. *Eur. J. Med. Chem.* **1995**, 30, 287-301.
- ²Lee, H. K., Cho, C. S. *Synth. Commun.* **2013**, 43, 915-921.
- ³Liu, R., Zhu, Y., Qin, L., Ji, S. *Synth. Commun.* **2008**, 38, 249-254.

SÍNTESE DE NANOPARTÍCULAS DE ALGINATO

Lorena L. de Freitas¹ (PG), Eloiza da S. N. Viali² (PQ), Erika C. Resende³ (PQ).
lorenafreitas871@gmail.com.

¹Instituto Federal de Educação Ciência e Tecnologia Goiano - Campus Rio Verde - GO. ²Instituto Federal de Educação Ciência e Tecnologia Goiano - Campus Rio Verde - GO. ³Instituto Federal de Educação Ciência e Tecnologia Goiano - Campus Iporá - GO.

Palavras-chave: Alginato, nanopartículas, estabilidade coloidal.

Atualmente para se obter uma melhor eficiência e melhor aproveitamento de determinado ativo utiliza-se a técnica de nanoencapsulamento. Sendo uma das maneiras de controlar a liberação de certas substâncias, podendo ser na forma de microesferas, micelas poliméricas e nanopartículas. Por sua vez, as nanopartículas possuem vantagens como, capacidade de incorporar substâncias tanto hidrofóbicas, quanto hidrofílicas, capacidade de transporte e estabilidade alta, e ainda podem ser administradas por diferentes vias. Com isso, objetivou-se realizar um fatorial 3X2, utilizando o método superfície resposta, para avaliar a estabilidade das nanopartículas de alginato. Inicialmente foram adicionadas as soluções de alginato (10 mg/mL) em diferentes proporções variando de 1,2 a 3,6 mL e tween (50 mg/mL) variando de 2 a 6 mL e completou com água para volume final de 20 mL. A mistura obtida foi colocada sob agitação magnética vigorosa, e por 30 minutos foram adicionados 4 mL da solução de CaCl₂ gota a gota lentamente com auxílio de uma micropipeta. Passado os 30 minutos, adicionou-se 4 mL da solução de CTAB repetindo o procedimento anterior. Ao final foram obtidas nove amostras de nanopartículas de alginato, e acompanhada a estabilidade coloidal das mesmas através de leituras em espectrofotômetro UV-vis a comprimento de onda de 650nm durante 40 dias, e novamente após três meses. Durante os 40 dias foi observado que três amostras se desestabilizaram primeiro, as quais continham menor quantidade de tween e alginato e maior quantidade de CTAB. Já após três meses pode se observar tanto visualmente, quanto por meio das absorbâncias que apenas duas formulações continuavam estáveis, uma delas continha maior quantidade de tween e alginato e a outra menor quantidade de alginato. Com este teste pode-se concluir que para as formulações continuarem estáveis por um período maior, seria necessário fixar a quantidade de alginato no valor máximo (3,6mL - 10mg/mL), e utilizar maiores volumes de tween, o qual auxilia na estabilidade das nanopartículas.

Referências

1. LERTSUTTHIWONG, P.; ROJSITTHISAK, P.; NIMMANNIT, U, *Materials Science and Engineering*, 2009, 29, 856.
2. SORASITTHIYANUKARN, F. N., BHUKET, P. R. N. B., MUANGNOI, C., ROJSITTHISAK, P., ROJSITTHISAK, P, *International Journal of Biological Macromolecules*, 2019, 131, 1125.

SÍNTESE DE SUBSTÂNCIAS HETEROAROMÁTICAS NITROGENADAS E INVESTIGAÇÃO DO POTENCIAL ANTIOXIDANTE

Jaciel G. dos Santos^{1*}(IC), Adriany da Silva¹(IC), Cynara A. Cintra¹(IC), Joyce M. dos Santos¹(IC), Claudemir Batalini¹(PQ) – jacieljack13@hotmail.com

¹ Universidade Federal de Mato Grosso - ICET/CUA, LAPQUÍM - Unidade II – Barra do Garças- MT.

Palavras-chave: Síntese orgânica, atividade antioxidante, ésteres, amidas, Química Verde.

Ésteres e amidas constituem-se importantes intermediários para o desenvolvimento de novos flavorizantes, cosméticos, fármacos, entre outros. O objetivo deste trabalho foi sintetizar e caracterizar três substâncias heteroaromáticas nitrogenadas derivadas do ácido benzóico, sendo dois ésteres e uma amida, benzoato de 4-quinazolinila (**P₁**), benzoato de 4-imidazolfenila (**P₂**) e N-4-imidazolfenilbenzamida (**P₃**) e avaliar o potencial antioxidante qualitativo das mesmas. O método de Schotten-Baumann¹ foi o empregado para as preparações, em que 0,012 mols dos reagentes de partida foram inicialmente dissolvidos em 100 mL de NaOH 10% e mantidos sob agitação por 15 minutos até completa solubilização. Em seguida foram adicionados 0,06 mols de cloreto de benzoíla. As sínteses foram mantidas em agitação constante por 1 hora, sob temperatura ambiente e ao final o pH das reações foi ajustado até cerca de 6,0 com a adição de HCl concentrado, para a completa formação dos cristais, que foram então filtrados, lavados com água destilada e secos em estufa a 50°C. Na caracterização por ponto de fusão obteve-se: P₁ = 150°C, P₂ = acima de 340°C e P₃ = 153°C. Os rendimentos reacionais dos cristais foram: P₁ = 14,2% (cristais brancos), P₂ = 11,0% (cristais marrom) e P₃ = 89,0% (cristais bege). Os espectros de infravermelho das três substâncias revelaram os principais estiramentos esperados (N-H, C=O, C=N, C=C aromático e C-O). Foi utilizada uma solução metanólica de 0,4 mmol.L⁻¹ do radical difenilpicrilhidrazila (DPPH), borrifado em placas de CCD para a análise do potencial antioxidante qualitativo das substâncias sintetizadas e apenas P₃ revelou atividade antioxidante, comparado com o padrão rutina. Os rendimentos baixos obtidos para os ésteres P₁ e P₂ podem estar relacionados à dificuldades de precipitação no ajuste de pH. A metodologia empregada se encontra mais alinhado a alguns dos princípios da Química Verde², uma vez que o emprego de temperatura ambiente, meio aquoso e a não necessidade de solventes de extração tóxicos para os produtos garantiram um processo sintético mais amigável ao meio ambiente.

Agradecimentos

À UFMT-CUA e ao LAPQUÍM pelo suporte científico nas atividades.

Referências

1. BAMANE, R. V.; RAKHOLIYA, V. K.; CHITRE, T. S. *Heterocyclic Letters*, v. 1, n. 3, p. 263–268, 2011.
2. SALEH, H. E. M.; KOLLER, M. *Principles of Green Chemistry*, Intechopen, 2018.

Síntese e avaliação do potencial antioxidante *in vitro* de híbridos de imidazo-[1,2- α]-piridinas e benzimidazóis em núcleos de cumarina

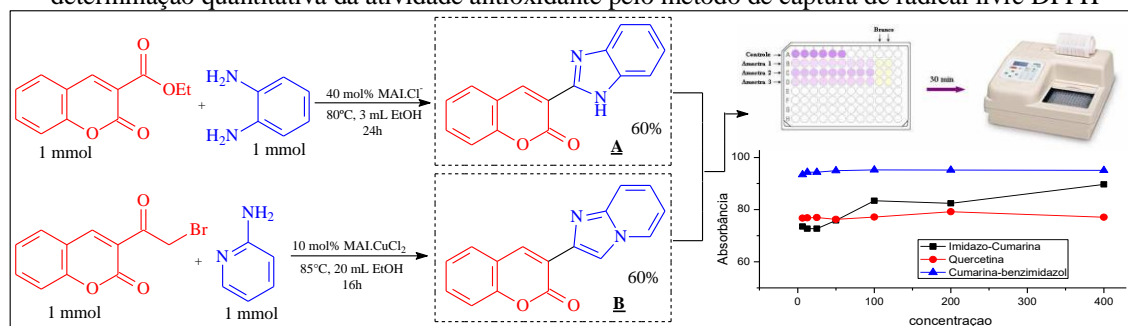
Alexandre L. de Paula^{1*} (IC), Juliana G. de Moraes¹ (PG), Jhonathan R. N. dos Santos¹ (PG), Luciana M. Ramos¹ (PQ). *e-mail: lpallexandre@icloud.com

¹Universidade Estadual de Goiás, Laboratório de Química Medicinal e Síntese Orgânica (LaQuiMeSo)

Palavras-chave: cumarina, imidazo[1,2- α]piridina, benzimidazol.

Os compostos híbridos combinam diferentes farmacóforos em uma mesma estrutura, o que os tornam moléculas importantes para o planejamento de drogas sintéticas. As cumarinas, as imidazo-[1,2- α]-piridinas e os benzimidazóis são classes distintas de compostos biologicamente ativos utilizadas na síntese de híbridos.¹⁻³ Derivados de cumarina apresentam atividade antioxidante, antimicrobiana e outras. A estrutura da imidazo[1,2- α]piridina está presente em diversos medicamentos ansiolíticos ou hipnóticos; já para o núcleo do benzimidazol são reportadas atividades anti-inflamatórias, antivirais, entre outras.^{2,3} Visando à incorporação destes, o presente trabalho propõe a síntese de dois híbridos: 3-(1*H*-benzimidazol-2-il)cromeno-2-ona **A** e 3-(imidazo[1,2- α]piridin-2-il)-2*H*-cromeno-2-ona **B**, com avaliação do potencial antioxidante (Esquema 1) através do método de sequestro do radical livre 2,2-difenil-1-picril-hidrazil (DPPH).

Esquema 1. Síntese dos híbridos benzimidazol-cumarina e imidazo[1,2- α]piridina-cumarina e determinação quantitativa da atividade antioxidante pelo método de captura de radical livre DPPH



Foi obtido 60% de rendimento dos derivados **A** e **B** por meio de uma catálise com líquido iônico (obedecendo aos princípios da química verde por ser atóxico e recuperável ao final da síntese), superior se comparado a ácidos e bases de Lewis e Brønsted-Lowry. O % de redução de DPPH nas concentrações de 6.25, 12.5, 25, 50, 100, 200 e 400 μ M/mL (89% para o derivado imidazo e 79% para o derivado benzimidazol) ficaram próxima ao padrão quercetina (95%). A mudança na posição do nitrogênio resulta em duas classes de compostos com potencial antioxidante, tornando-os interessantes candidatos a fármacos.

Agradecimentos

CAPES, FAPEG, CNPq e UEG.

Referências

1. Saadeh, H. A.; Mosleh, I. M.; Mubarak, M. S. *Molecules*, **2009**, 14, 1483.
2. Kumar, P. V.; Rao, V. R. *Indian Journal of Chemistry*, **2005**, 44, 2120.
3. Tsay, S. C.; Hwu, J. R.; Singha, R.; Huang, W. C.; Chang, Y. H.; Hsu, M. H.; Shieh, F.; Lin, C. C.; Hwang, K. C.; Horng, J. C.; Clercq, E. D.; Vlieghe, I.; Neyts, J. *European Journal of Medicinal Chemistry*. **2013**, 63, 290.

Síntese e caracterização de aditivos antioxidantes aromáticos compatíveis ao biodiesel

Ana Luiza R. R. da Cunha^{1*} (IC), Lilian R. Batista¹ (PG), Aline S. Muniz¹ (PG), Nelson R. Antoniosi Filho¹ (PQ).

analuziarodriguesdacunha@hotmail.com

¹ 74690-900, Universidade Federal de Goiás, Avenida Esperança s/n, Campus Samambaia, Goiânia-Goiás-Brasil.

Palavras-chave: Antioxidante, Aromáticos, Biodiesel.

O uso de antioxidantes é muito importante na sociedade contemporânea em que vivemos, seja no âmbito alimentício, cosmético ou combustível. Nos últimos anos, o biodiesel vem sendo adicionado ao diesel de petróleo, contudo, as insaturações nos ésteres deixam sua estabilidade oxidativa baixa comparada aos hidrocarbonetos minerais¹. Dessa forma, é necessário o emprego de antioxidantes e esse trabalho propõe um método rápido e simples para a alquilação de moléculas aromáticas que agem como antioxidantes quando adicionadas ao biodiesel. A síntese foi realizada utilizando as moléculas aromáticas hidroquinona, catecol e tolueno. O álcool terc-butilíco foi usado como agente alquilante. Os reagentes foram utilizados na proporção 1:3,5:4 (aromático: terc-butanol: H₂SO₄). Em um béquer com agitação magnética, o aromático e o ácido foram adicionados primeiro, seguido da adição gota-a-gota do terc-butanol. Após a adição de álcool, a mistura foi purificada com água (5x) e os produtos foram denominados 2-HQTB, CTB e TTB (derivados de hidroquinona, catecol e tolueno, respectivamente). A caracterização foi feita por meio de FTIR-ATR 32 varreduras na faixa de 4000 a 650 cm⁻¹, RMN ¹³C realizada em espectrômetro Bruker 500 - MHz, e estabilidade oxidativa Rancimat (EN 14112). As diluições dos produtos sintetizados no biodiesel foram feitas nas proporções de 250, 500, 1000, 2000 e 5000 ppm, contudo, apenas os produtos 2-HQTB e CTB apresentaram boa atividade antioxidante no biodiesel (Figura 1) o qual apresenta estabilidade de 8 horas². Portanto, pode-se concluir que a rota sintética proposta é efetiva para a produção de antioxidantes aromáticos, porém, apenas os compostos 2-HQTB e CTB se mostraram eficientes na capacidade antioxidante, sendo que apenas o 2-HQTB é eficaz segundo as novas normas², que preveem estabilidade mínima de 12 horas.

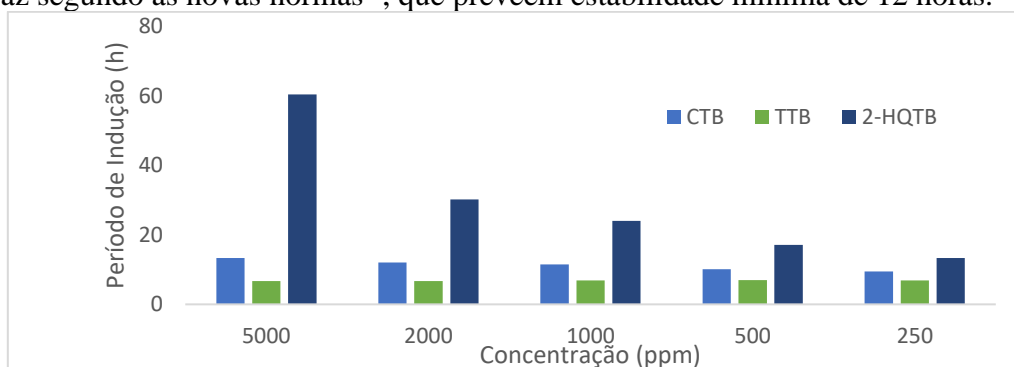


Figura 1: Estabilidade Oxidativa dos compostos sintetizados em biodiesel.

Agradecimentos

UFG, FUNAPE, CAPES, CNPQ, MCT, FINEP e CTINFRA.

Referências

1. Mozer, B. R., Efficacy of gossypol as an antioxidant additive in biodiesel, Renewable Energy, 2012, V. 40, 65.
2. BRASIL. Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. Resolução ANP n° 45, de 25 de agosto de 2014. Diário Oficial da União, Brasília, DF, p. 68, ago, 2014.

Síntese e caracterização de um complexo de paládio(II) contendo um ligante pirazol-imina derivado do 2-hidróxi-naftaldeído

Vitor A. B. Peres¹ (IC)*, Bárbara Tirloni² (PQ), Cristiane S. Schwalm¹ (PQ).
vitorperes2001@hotmail.com

¹Universidade Federal da Grande Dourados, Dourados-MS

²Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria-RS

Palavras-chave: pirazol, bases de Schiff, compostos de coordenação.

A utilização de ligantes pirazólicos em reações de acoplamento cruzado vem sendo bastante explorada na literatura, e faz parte da tendência de desenvolvimento de sistemas catalíticos a base de ligantes nitrogenados como alternativa aos ligantes do tipo fosfina tradicionalmente utilizados.¹ Neste contexto, ligantes bases de Schiff derivadas do pirazol foram apenas brevemente investigados na literatura, apesar de apresentarem-se como estruturas-modelo interessantes, uma vez que a função imina permite a variação modular de características eletrônicas e estéricas ao redor do centro metálico de maneira bastante direta.^{2,3} Assim, o presente trabalho tem como objetivo a síntese e caracterização de um complexo de paládio (II) inédito a partir do ligante pirazol-imina **L1** (Figura 1), para futura avaliação de atividade catalítica em reações de acoplamento cruzado.

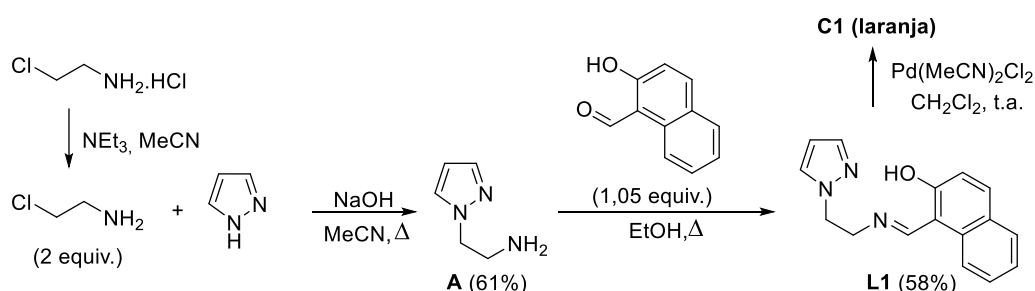


Figura 1. Síntese do ligante pirazol-imina **L1** e preparação do respectivo complexo de Pd(II) (**C1**).

O ligante **L1** foi preparado de acordo com a rota descrita na Figura 1, sendo obtido com 35% de rendimento global em duas etapas a partir de reagentes comerciais. A reação de complexação foi realizada em diclorometano, à temperatura ambiente, por 24 horas, utilizando Pd(MeCN)₂Cl₂ como fonte de paládio. O sólido laranja obtido foi caracterizado por IV, MEV-EDS e TG-DSC e o conjunto de análises sugere a formação de um complexo do tipo PdLCl, no qual a pirazol-imina atua como um ligante monoaniônico tridentado. No momento, tentativas de obtenção de um monocristal apropriado para confirmação da estrutura de **C1** via difração de raios X encontram-se em andamento.

Agradecimentos

UFGD, CAPES, CNPq e FINEP.

Referências

- Ojwach, S. O., Darkwa, J. *Inorg. Chim. Acta* **2010**, 363, 1947.
- Mukherjee, A.; Sarkar, A. *Tetrahedron Lett.* **2005**, 46, 15.
- Boltina, S., Yankey, M., Guzei, I. A., Spencer, L. C., Ojwach, S. O., Darkwa, J. *S. Afric. J. Chem.* **2012**, 65, 75.

Síntese e caracterização ótica do poli(9-9dihexilfluoreno)-co-tiofeno

Arthur S. Espíndola¹ (IC), Fernando H. Cristovan¹ (PQ). *arthursantos1580@gmail.com*

¹Unidade Especial de Ciências Exatas e Tecnologia, Universidade Federal de Jataí.

Palavras-chave: polímero condutor, copolimerização, caracterização ótica.

Semicondutores orgânicos apresentam uma grande versatilidade de aplicações como em células fotovoltaicas (OPVs) e diodos orgânicos emissores de luz (OLED). O OPVs operam da seguinte forma: quando um elétron absorve energia este é excitado assim passando do orbital HOMO para o LUMO do aceitador ($\pi-\pi^*$) deixando uma lacuna no orbital HOMO, para que isso ocorra o aceitador deve possuir uma menor função de trabalho já o material que irá trabalhar com as lacunas deve apresentar uma maior função de trabalho [1]. Nos OLED o polímero condutor é depositado entre os eletrodos diminuindo a lacuna na interface do ânodo, os elétrons são injetados no cátodo este processo depende da função de trabalho do cátodo e o LUMO, a interação entre o elétron e a lacuna há a emissão de um fóton. OLEDs apresentam vantagens sob o LED como maior flexibilidade, leveza, a possibilidade de produzir telas mais finas e o requerendo menor energia. Com o avanço desta tecnologia é possível realizar a ação reversa converter luz em energia (OPVs). O emprego de polímeros como o polifluoreno, onde fluoreno é unidade básica, deve-se a localização de seu baixo HOMO, propício para gerar uma tensão de circuito aberto elevado em células fotovoltaicas. Já os tiofenos atuam como doador de elétrons e o átomo de enxofre induz uma maior planaridade da cadeia polimérica devido ao acúmulo de carga sobre este átomo. A planaridade da cadeia favorece o aumento da cristalinidade dos filmes formados e consequentemente uma maior eficiência do transporte elétrico. Desta forma neste trabalho está sendo estudado a síntese do poli(9,9-dihexilfluoreno)-co-tiofeno que foi preparado através da rota de Suzuki-Miyaura sob atmosfera inerte utilizando o tetrakis(trifenilfosfina)paládio(0) como catalisador. O polímero formado foi purificado por extração em Soxhlet e caracterizado por espectroscopia de absorção no infravermelho FT-IR e no UV-Vis. Em seguida, foi estudado a dopagem do material com o tetracianoquinodimetano (TCNQ). Os filmes foram preparados pela técnica de *casting*. O espectro de FT-IR do polímero apresentou as bandas características do dihexilfluoreno, em aproximadamente 2900 cm^{-1} proveniente de carbonos alifáticos sp^3 , uma banda em torno de 670 cm^{-1} proveniente do enxofre do monômero tiofeno, comprovando a formação do polímero (65% de rendimento), já no polímero dopado foi observado uma banda em aproximadamente 2190 a banda proveniente do grupo $\text{C}\equiv\text{N}$ do TCNQ. Foi realizado o teste de solubilidade do polímero, este apresentou alta solubilidade em solventes de baixa polaridade, como os organoclorados (clorofórmio e diclorometano). Desta forma, foi utilizado estes solventes para se preparar os filmes do polímero e realizar o estudo da dopagem do material. Os espectros de UV-Vis dos filmes mostraram uma banda de absorção em aproximadamente 430 nm proveniente da transição $\pi-\pi^*$ do anel do fluoreno. No entanto, quando o polímero foi dopado com 1% (m/m) de TCNQ houve um deslocamento hipsocrômico para 405 nm, devido possivelmente a formação de um complexo de transferência de carga entre o polímero e o dopante.

Referências

1. RANGER, Maxime et al. New Well-Defined Poly(2,7-fluorene) Derivatives: Photoluminescence and Base Doping. *Macromolecules*, [s.l.], v. 30, n. 25, p.7686- 7691, dez. 1997. American Chemical Society (ACS).

Síntese, caracterização e determinação da atividade antioxidante e antibacteriana *in vitro* de derivados Tetrahidrobenzo[*b*]piranos

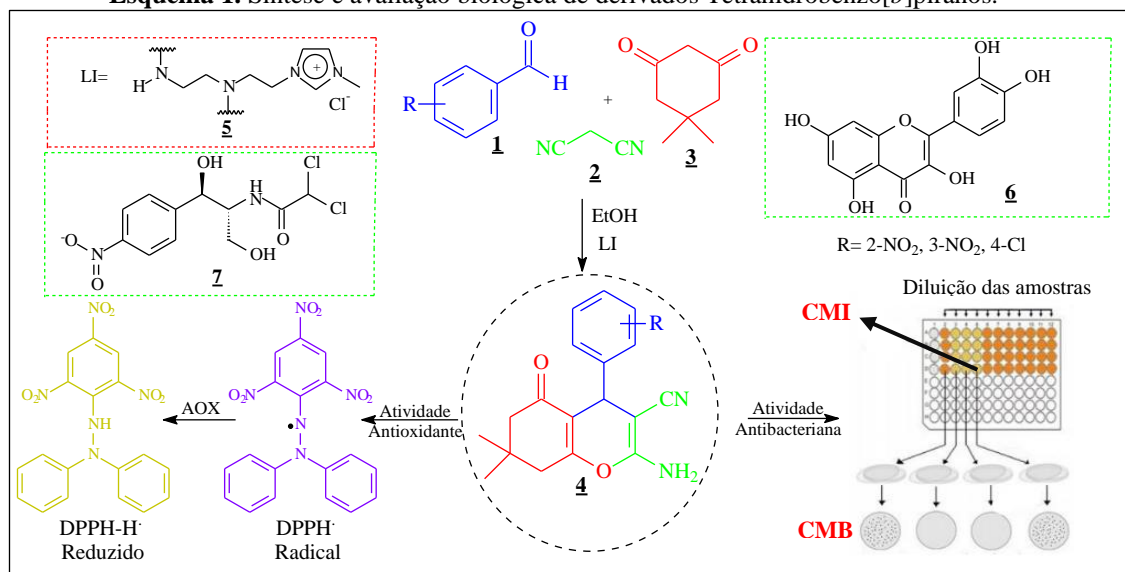
Jhonathan R. N. dos Santos¹ (PG), Juliana G. de Moraes¹ (PG), Yasmine B. de Queiroz¹ (PG), Osvaldo G. Pinto (PQ)¹, Luciana M. Ramos¹ (PQ), Luciano Ribeiro¹ (PQ) *jhonathanquimica@gmail.com*

¹Universidade Estadual de Goiás

Palavras-chave: 4*H*-pirano, atividade antioxidante, reações multicomponente, líquidos iônicos

Tetrahidrobenzo[*b*]piranos, são heterocíclios dispostos por um núcleo aromático fundido a um núcleo 4*H*-pirano. Esta classe desperta interesse em estudos devido a suas atividades farmacológicas, incluindo antitumoral, analgésica e antiinflamatória^[1]. Nesta vertente, este trabalho objetivou-se determinar a atividade antibacteriana e antioxidante de derivados tetrahidrobenzo[*b*]piranos obtidos via reação multicomponente (RMC) catalisada por um Líquido Iônico (LI). Desta forma, empregou-se aldeídos aromáticos **1**, malononitrila **2** e dimedona **3**, em refluxo na presença de Etanol e da enzima sintética ionicamente marcada **5**, obtida conforme descrito na literatura^[2] (Esquema 1).

Esquema 1. Síntese e avaliação biológica de derivados Tetrahidrobenzo[*b*]piranos.



Os derivados obtidos foram recristalizados e caracterizados por meio de FT-IV, RMN ¹H, ¹³C e EM. Em seguida, os mesmos foram submetidos ao ensaio de microdiluição em caldo^[3], frente a *Staphylococcus aureus* (ATCC 29213), para a validação da técnica foi usado o antibiótico Cloranfenicol **7**, o potencial antioxidante dos derivados foram investigadas frente a técnica espectrométrica do radical 2,2- difenil-1-picril-hidrazil (DPPH)^[4]. Neste contexto, os derivados possuíram uma concentração mínima inibitória (CMI) variando 62,5-1000 µg/mL e atividade sequestradora de radical entre 89-92%, comparado com o padrão Quercetina **6** com 95% de inibição. Dado o exposto, se conclui que os compostos são sensíveis as cepas estudadas e possuem uma atividade antioxidante relevante, uma vez que apresentam bons índices de inibição do radical DPPH.

Agradecimentos

CAPES, FAPEG, CNPq, UEG, IQ-UnB

Referências

1. Wang, C. *Biom. Res. India.* ,**2016**, 27, S322-S325.
2. Ferreira, J. G. L.; Ramos, L. M.; Oliveira, A. L.; Orth, E. S.; Neto, B. A. D. *JOC*, **2015**, 80, 5979.
3. Clinical and Laboratory Standards Institute-M7-A10, **2015**, 35, 2.
4. Santos, S. N.; Castanha, R. F.; Haber, L. L.; Marques, M. O. M.; Scramim, S.; Melo, I. S. *Embrapa Meio Ambiente. Comunicado Técnico*, **2011**.

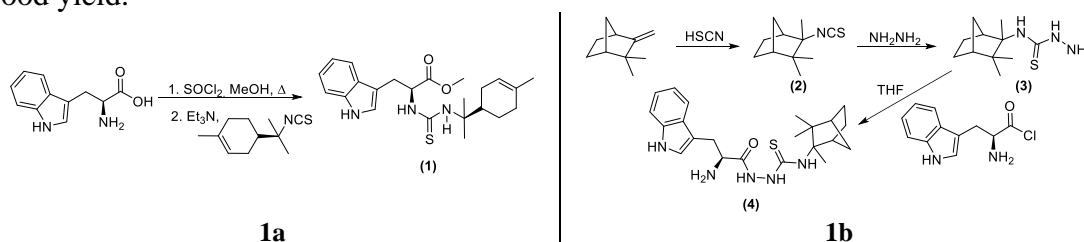
Synthesis of terpene-thiosemicarbazide and thiosemicarbazones amino acid derivatives

Gabriela F. Matos (PG)¹, Olga S. Rêgo (PQ), Lucilia Kato (PQ)¹ and Cecília Maria (PQ)¹ *gformatoss@gmail.com*

¹Laboratório de Produtos Naturais, Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás. ²Laboratório de Síntese Molecular, Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás.

Keywords: Amino acid, Camphene, Thiosemicarbazones.

Previous studies have demonstrated various important pharmacological applications of thiosemicarbazones, such as antiviral¹, antiprotozoal², antitumoral³, antibacterial⁴. In this way, for the purpose to synthesis the camphene-thiosemicarbazones derived, Souza et al., have synthesized several camphene-thiosemicarbazones which they can be applied to Tuberculosis treatment.⁵ In our research group, limonene-thiosemicarbazide derivatives were synthesized using tryptophan obtained yellow solid with yields of 43% (Scheme 1a). In this approach, the objective of this study is the synthesis of camphene-thiosemicarbazones derivatives using the tryptophan chloride as described in scheme 1b. The products 2 and 3 were obtained with yields of 80%. The compounds 1, 2 and 3 were characterized by infrared spectroscopy and ¹H NMR. The compound 4 (Scheme 1b), characterized by infrared spectroscopy, was obtained with good yield.



Scheme 1: Synthetic routes for limonene-thiosemicarbazide (a) and camphene-thiosemicarbazones (b).

In this way, other amino acids (such valine, histidine, tyrosine and methionine) will be used to synthesize camphene and limonene-thiosemicarbazide (Scheme 1a). After optimization of synthetic route 1b, others chlorinated amino acids will be used, as well the other terpenes. Furthermore, the biological applications of these compounds will be explored.

Agradecimentos

CAPES, FAPEG, CNPQ

Referências

- Casas, J. S., Garcia-Tasende, M. S., Sordo J. *Coord Chem.* 209:197–261, **2000**.
- Bharti, N., Husain, K., Gonzalez, G. M. T., Cruz-Veja C. G. J., Mata-Cardenas, B. D., Naqvi, F., Azam, A. *Bioorg Med Chem Lett.* 12:3475–3476, **2002**.
- Vandresen, F., et al. *Eur J Med Chem.* 79:110–116, **2014**.
- Guzel, O., Karali, N., Salman, A. *Bioorg Med Chem.* 16:8976–8987, **2008**.
- Souza, M. R. P. et al. *Natural product research.* 33: 3372-3377, **2019**.

Uso das redes moleculares para desrepliação da fração acetato de etila de *Waitea circinata*

João V. S. de Oliveira¹ (IC)*, Diego A. Silva¹ (PG), Matheus S. de Souza¹ (PG), Leila G. de Araújo² (PQ), Lucília Kato¹ (PQ). oliveira.joao@discente.ufg.br

¹Laboratório de Produtos Naturais e Síntese Orgânica - IQ/UFG.

²Laboratório de Genética de Microorganismos - ICB/UFG

Palavras-chave: *Waitea circinata*, espectrometria de massas, redes moleculares.

O fungo micorrízico orquídeo *Waitea circinata*, isolado da orquídea *Epidendrum nocturnum*, espécie nativa do cerrado, possui atividade inibitória de fungos fitopatogênicos como o *Magnaporthe oryzae*, causador da brusone no arroz. (CARVALHO et al., 2015). Ainda não há relatos na literatura acerca de seus metabólitos secundários, o que caracteriza a importância da identificação de seus metabólitos, bem como a sua correlação com a atividade biológica.

A elucidação estrutural de moléculas é laboriosa, de modo que a utilização de técnicas acopladas como a cromatografia líquida de alta eficiência acoplada à espectrometria de massas (CLUE/EM) têm sido utilizadas para a visualização preliminar do perfil químico de extratos. A desrepliação consiste na utilização de informações de estruturas químicas já conhecidas para a sua identificação sem que seja necessário repetir isolamentos. (WANG et al., 2016). Neste sentido, o presente trabalho teve como objetivo a utilização dos dados obtidos dos experimentos de CLUE/EM para a desrepliação do extrato da massa micelial de *Waitea circinata* utilizando a plataforma Global Nature Products Social (GNPS).

O extrato da massa micelial foi obtido pela raspagem dos micélios do fungo cultivado em meio de cultura BDA (batata-dextrose-ágar) e extração à frio com acetato de etila. O extrato foi particionado utilizando-se funil de Buchner com placa porosa e sílica gel 60 (70-230 mesh), originando as frações clorofórmio, acetato de etila e metanol. As frações acetato de etila e metanol foram submetidas ao experimento data dependent de CLUE/EM no modo positivo de ionização, fornecendo o espectro de EM/EM para os 5 íons precursores de maior intensidade.

Os dados de massa foram carregados à plataforma do GNPS, responsável pela desrepliação, seguindo o protocolo padrão para equipamentos de alta resolução. (WANG et al., 2016). Uma análise preliminar sugere a presença de ácidos graxos e aminoácidos de cadeia longa. A análise das redes moleculares e dos espectros de fragmentação de massas serão realizadas com a possível notação dos metabólitos produzidos no micélio.

Agradecimentos

Centro Regional para o Desenvolvimento Tecnológico e Inovação (CRTI)
Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)

Referências

1. Wang, M. et al. Sharing and community curation of mass spectrometry data with Global Natural Products Social Molecular Networking. *Nature Biotechnology*, v. 34, n. 8, p. 828–837, 2016.
2. Carvalho, J. C. B. et al. Biocontrol potential of *Waitea circinata*, an orchid mycorrhizal fungus, against the rice blast fungus. *Tropical Plant Pathology*, v. 40, p. 151-159, 2015

Variação da composição química do óleo essencial dos frutos de *Schinus terebinthifolius* Raddi

Janaine A. Marangoni¹(PG), Sidney M. dos Santos¹(PG), Pedro Cruz O. Jr¹(PG), Kamilla F. do Nascimento²(PG), Julyana A. T. Borges(PG)², Anelise S. N. Formagio^{1,2}(PQ). *janaine_dec4@hotmail.com*

¹Faculdade de Ciências Biológicas e Ambientais, Universidade Federal de Grande Dourados - UFGD, Dourados - MS, Brasil

²Faculdade de Ciências da Saúde, Universidade Federal de Grande Dourados - UFGD, Dourados - MS, Brasil.

Palavras-chave: Pimenta rosa; Careno - δ -3; β -pineno; Limoneno

Schinus terebinthifolius Raddi. é uma planta nativa da América do Sul, popularmente conhecida como pimenta-rosa, aroeira-vermelha¹, seus frutos são ricos em óleo essencial, podendo ser cinco vezes superior ao encontrado nas folhas². Fatores bióticos e abióticos podem interferir na composição química das plantas³. O objetivo deste trabalho foi verificar a composição química do óleo essencial dos frutos *S. terebinthifolius* (OEST) coletados nos estados de Mato Grosso do Sul (MS), Paraná (PR) e São Paulo (SP). As amostras de OEST extraídas por hidrodestilação por arraste a vapor a partir de frutos coletados dos três estados (MS, PR e SP) no mês de junho/2019 foram quantificadas por CG/EM e a determinação da composição química foi realizada pela comparação dos índices de retenção das amostras e os espectros de massa, pela literatura padronizada⁴. A análise de CG/EM identificou 47 compostos em OEST-MS, 33 compostos em OEST-SP e 25 compostos em OEST-PR. A tabela 1 descreve os compostos majoritários identificados. A realização desse estudo evidenciou que os fatores bióticos e abióticos interferem na composição química do óleo essencial dos frutos de *S. terebinthifolius*.

Tabela 1: Composição química das amostras de OEST

Compostos	IC	IR ⁴	(%) OEST-MS	(%) OEST-SP	(%) OEST-PR
α -pineno	932	932	14,91	9,93	11,43
α -fencheno	945	945	0,09	0,16	4,32
Sabineno	976	969	0,54	0,62	9,01
β -pineno	979	979	3,5	28,15	8,63
α -felandreno	1002	1002	5,85	19,26	-
Careno- δ -3	1008	1008	31,05	-	-
Limoneno	1023	1024	5,5	13,09	14,01
α -Copaeno	1374	1374	-	0,12	9,03
Germacreno D	1485	1484	-	-	6,86
α -eudesmol	1647	1652	4,33	2,35	-

Agradecimentos

Capes, Fundect, UFGD e UEMS

Referências

1. Carvalho, P. E. R., et al., Embrapa Informação Tecnológica; Colombo: Embrapa Florestas, 2003, p. 1039.
2. Clemente, A.D.. Tese (Doutorado Em Agroquímica). Universidade Federal De Viçosa, Viçosa, MG, 2006, p.63.
3. GOMES, V., et al., Biochemical Systematics and Ecology, 2013, v. 48, p. 222.
4. Adams, R.P., Identification of essential oil components by gas chromatography/mass spectrometry, 2007, 4ªed., p.804.