

LIVRO DE RESUMOS



SBQ SUL

29° Encontro de Química da Região Sul

Um olhar para o futuro

**Universidade Federal de Pelotas (UFPeI)
Faculdade de Agronomia Eliseu Maciel (FAEM)
Capão do Leão - RS – Brasil
2023**

Realização



Patrocínio



Apresentação

Os Encontros de Química da Região Sul são encontros anuais, organizados pelas secretarias regionais dos estados do RS, SC e PR, desde 1993, em conjunto com as Universidades. Esses encontros fomentam debates pertinentes às diferentes áreas da Química, envolvendo ensino, pesquisa e inovação tecnológica.

O 1º Encontro de Química da Região Sul – SBQ-SUL foi realizado em 1993, em Florianópolis nas dependências da UFSC, com o tema “*Caminhos para a Integração da Química na Região Sul*”. De lá para cá, foram mais 28 encontros, todos cobertos de pleno êxito, no que se refere à participação de estudantes e profissionais, dos mais variados segmentos da Química, como também na apresentação de trabalhos de elevado grau científico e tecnológico.

Em 2003, a Universidade Federal de Pelotas (UFPel) sediou o 11º Encontro, com o tema “*A Química e os novos desafios*” e contou com 784 participantes e 451 trabalhos. Em 2019, a 26ª edição da SBQ Sul foi realizada na cidade de Caxias do Sul. No ano de 2020, devido a pandemia de COVID-19, não foi possível realizar o evento, que, seguindo o rodízio dos estados da Região Sul, seria sediado em SC. Em 2021, garantindo a continuidade dos encontros das regionais sul, o 27º Encontro da SBQ Sul foi realizado em Itajaí, SC, na UNIVALI, no formato online interativo. Em 2022, na cidade de Ponta Grossa, PR, o 28º Encontro da SBQ Sul foi importante, pois simbolizou a retomada dos eventos 100% presenciais após a pandemia de COVID-19, contando com a presença de 350 inscritos.

O ano de 2023 é muito importante, pois estamos comemorando os 30 anos de existência dos Encontros de Química da Região Sul e coube à UFPel, a honra de sediar a 29º edição desse evento, carinhosamente chamado de “SBQ-SUL”. A temática escolhida para o encontro foi “**SBQ Sul 30 anos. Um olhar para o futuro**”. Pretende-se constituir um momento de reflexão e troca de ideias sobre o que queremos e os desafios que teremos que enfrentar no futuro da Química na Região Sul.

Índice

	página
Apresentação.....	2
Coordenação do Evento.....	4
Comitê Organizador -UFPEL.....	4
Comitê de Apoio (Alunos da UFPEl).....	5
Comitê Científico.....	6
Programação.....	8
<i>Química Analítica</i>	11
Sessões Coordenadas - Química Analítica.....	12
Sessões de Pôsteres - Química Analítica.....	13
<i>Resumos Química Analítica</i>	19
<i>Química Inorgânica</i>	112
Sessões Coordenadas - Química Inorgânica.....	113
Sessões de Pôsteres – Química Inorgânica.....	114
<i>Resumos Química Inorgânica</i>	115
<i>Química Orgânica</i>	137
Sessões Coordenadas - Química Orgânica.....	138
Sessões de Pôsteres - Orgânica.....	139
<i>Resumos Química Orgânica</i>	144
<i>Físico-Química</i>	223
Sessões Coordenadas – Físico-Química.....	224
Sessões de Pôsteres – Físico-Química.....	225
<i>Resumos Físico-Química</i>	228
<i>Ensino de Química</i>	274
Sessões Coordenadas – Ensino de Química.....	275
Sessões de Pôsteres – Ensino de Química.....	276
<i>Resumos Ensino de Química</i>	278



SBQ SUL

29º Encontro de Química da Região Sul

Um olhar para o futuro

Coordenação do Evento

Prof. Dr. Anderson Schwingel Ribeiro – Coordenação Geral
Secretário Regional da SBQ-RS

Profa. Dra. Mariana Antunes Vieira – Coordenação Adjunta

Comitê Organizador – UFPel

Profa. Dra. Adriana Castro Pinheiro

Profa. Dra. Adriane Medeiros Nunes

Prof. Dr. Alessandro Cury Soares

Prof. Dr. André Francisco Pivato Biajoli

Prof. Dr. André Ricardo Fajardo

Prof. Dr. Bruno dos Santos Pastoriza

Profa. Dra. Daniela Bianchini

Prof. Dr. Diego da Silva Alves

Prof. Dr. Eder João Lenardao

Prof. Dr. Fabio Andre Sangiogo

Prof. Dr. Juliano Alex Roehrs (IFSul)

Prof. Dr. Márcio Santos da Silva

Prof. Dr. Robson da Silva Oliboni

Prof. Dr. Wiliam Boschetti

Comitê de Apoio (Alunos da UFPel)

Adryo Nobre Tavares

Ariana Silveira Lima

Caroline Signorini Gomes

Catarine Cavada

Charlene Barbosa de Paula

Charlie Guimarães Gomes

Gabriel Tavares Couto

Gustavo Bierhals Blödorn

Isadora Atrib Garcia

Jéssica da Rosa Porto

João Vitor Alves Soares de Paulo

Juliê Silveira da Costa

Karine Flores Vilke

Lucas Emanuel Beluzzo Iarocz

Mariana Moreira da Cunha

Nicolle Lima Bandeira

Sabrina Souza Ferreira

Savana Pereira de Medeiros

Taise Carlos Nunes

Tavane da Silva Rodrigues

Victória Ross Soares

Wanderson da Silva Roriz

Yasmin Ribeiro Bloedorn

Comitê Científico

Adriana Passarella Gerola (UFSC)
Alessandro Francisco Martins (UTFPR)
Alessandro Cury Soares (UFPEL)
Alexandre Tadeu Paulino (UDESC)
André Ricardo Fajardo (UFPEL)
Angélica Venturini Moro (UFRGS)
Antônio Luiz Braga (UFSC)
Bruna Adriane Fary (UFPEL)
Bruno dos Santos Pastoriza (UFPEL)
Carla de Andrade Hartwig (UFPEL)
Clarissa Piccinin Frizzo (UFSM)
Clarissa Marques Moreira dos Santos (UFPEL)
Daiane Dias (FURG)
Daniel Lazaro Gallindo Borges (UFSC)
Daniela Decker (UDESC)
Daniela Hartwig de Oliveira (UFPEL)
Diogo La Rosa Novo (UFPEL)
Douglas Cardoso Dragunski (UNIOESTE)
Eduardo Sidinei Chaves (UFSC)
Ernesto Schulz Lang (UFSM)
Fabio Andre Sangiogo (UFPEL)
Fábio Peres Gonçalves (UFSC)
Fernanda Andreia Rosa (UEM)
Fernando Roberto Xavier (UDESC)
Ismael Casagrande Bellettini (UFSC – Blumenau)
Izabel Cristina Riegel Vidotti Miyata (UFPR)
Jackson Damiani Scholten (UFRGS)

Jaqueline Ritter (FURG)
Josiane Caetano Dragunski (UNIOESTE)
Jurgen Andreaus (FURB)
Marcelo Gonçalves Montes D'Oca (UFPR)
Marcos Alexandre Geleski (FURG)
Marcus Eduardo Maciel Ribeiro (IFSUL – Novo Hamburgo)
Oswaldo de Lazaro Casagrande Junior (UFRGS)
Paulo Ricardo de Souza (UFSM)
Ricardo Ferreira Affeldt (UFSC)
Roberta Cargnelutti (UFSM)
Rochele Sogari Picoloto (UFSM)
Rosely Aparecida Peralta (UFSC)
Tiago Elias Frizzon (UFSC)

Programação

18 de outubro – Quarta-feira

10:30h – 17:30h Hall do prédio da FAEM	Credenciamento e Entrega de material
11:30h-13:00h Restaurante Universitário	Almoço
13h – 17:30h	MINICURSOS
Sala 310	<i>MC1: Ensino de Química</i> Processos da Ciência: entendimentos possíveis por meio da Arte Profa. Dra. Leila Inês Follmann Freire (UEPG)
Sala 300	<i>MC2: Físico-Química</i> Introdução às redes neurais com Python e Keras Prof. Dr. Robson da Silva Oliboni (UFPEL)
Anfiteatro (Sala A)	<i>MC3: Química Analítica</i> Espectrometria de absorção atômica: fundamentos e aplicações inovadoras Profa. Dra. Márcia Messias da Silva e Profa. Dra. Morgana Bazzan Dessuy (UFRGS)
Sala 308	<i>MC4: Química Inorgânica</i> Introdução aos Metais de Transição em Biologia Humana e Medicina Profa. Dra. Adriana Castro Pinheiro (UFPEL)
Sala 602	<i>MC5: Química Orgânica</i> Explorando a espectrometria de massas: Identificando intermediários reativos e decifrando reações químicas Prof. Dr. Thiago Barcellos da Silva (UCS)
15:30h-16:00h Hall do prédio da FAEM	Coffee break
18h - 18:30h	Solenidade de Abertura
18:30h – 19:15h	Apresentação Artística: Grupo de Acordeonista do Conservatório de Música
19:15h – 20:30h Auditório da FAEM	Conferência de abertura SBQ-Sul: Um olhar para o futuro - Sua história, trajetória e contribuição para o desenvolvimento científico e tecnológico na área da Química Prof. Dr. Nito Ângelo Debacher Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC)
20:30h – 22:30h Hall do prédio da FAEM	Coquetel de Confraternização

19 de outubro – Quinta-feira

08:30h-10:30h Hall do prédio da FAEM	Sessão de Pôsteres I (ÍMPARES)
10:30h-11:00h Hall do prédio da FAEM	Coffee break
11:00h-12:00h Auditório da FAEM	Plenária 1 Profa. Dra. Shriley Nakagaki Bastos (UFPR) Presidente da Sociedade Brasileira de Química (SBQ) “Sólidos multifuncionais para processos catalíticos heterogêneos mais sustentáveis”
12:00h-13:00h Restaurante Universitário	Almoço
13:00h-14:00h Auditório da FAEM	Conversa com Representante do Comitê JP-SBQ “Jovens Pesquisadores da Sociedade Brasileira de Química - conectando jovens pesquisadores do Brasil e do mundo” Profa. Dra. Juliana Christina Thomas (UFRGS)
14:00-16:00h	Miniconferências e Sessões Coordenadas
Sala 310	Ensino de Química/ Extensão Palestrante: Prof. Dr. Roberto Dalmo (UFPR) “Conhecimentos químicos para sobreviver ao apocalipse zumbi: uma experiência formativa” EDU 003; EDU 008; EDU 022; EDU 027; EDU 032
Sala 300	Físico-Química/Química de Materiais Palestrante: Prof. Dr. Giovanni F. Caramori (UFSC) “Overreact, um laboratório in sílico: Simulações microcinéticas químico-quânticas automatizadas para reações químicas complexas - implementação em Python” FSQ 011; FSQ 033; FSQ 016; FSQ 018; FSQ 015
Anfiteatro (Sala A)	Química Analítica/Ambiental Palestrante: Prof. Dr. Eliezer Quadro Oreste (FURG) “Desenvolvimento de sensores a partir de materiais alternativos” ANA 005; ANA 008; ANA 017; ANA 052; ANA 061
Sala 308	Química Inorgânica Palestrante: Prof. Dr. Edilson Valmir Benvenutti (UFRGS) “Um século de Química Inorgânica e Ciência de Materiais” INO 002; INO 003; INO 017; INO 018; INO 022
Sala 602	Química Orgânica Palestrante: Profa. Dra. Fernanda Andréia Rosa (UEM) “Heterociclos Nitrogenados: Síntese e aplicação farmacológica de azóis, azinas e azepinos” ORG 001; ORG 011; ORG 015; ORG 042; ORG 078
16h-16:30h Hall do prédio da FAEM	Coffee break
16:30h-17:30h Auditório da FAEM	Plenária 2 Prof. Dr. Carlos Alberto Marques (UFSC) “Desafios ao Ensino de Química no Brasil: presença no currículo e compromissos com a sustentabilidade ambiental”
17:45h-18:30h Auditório da FAEM	Reunião das Secretarias Regionais PR, SC e RS
19:30h-23:00h	Jantar de Confraternização (por adesão)

20 de outubro – Sexta-feira

08:30h-10:30h Hall do prédio da FAEM	Sessão de Pôsteres II (PARES)
10:30h-11:00h Hall do prédio da FAEM	Coffee break
11:00h-12:00h Auditório da FAEM	Plenária 3 Prof. Dr. César Ricardo Teixeira Tarley (UEL) <i>“Desenvolvimento de métodos analíticos baseados em microsistemas de pré-concentração sólido-líquido e líquido-líquido”</i>
12:00h-13:00h Restaurante Universitário	Almoço
13:00h-14:00h	Conversa com o Conselho Regional de Química – 5ª região <i>“Os profissionais da Química: atribuições, contribuições e perspectivas para a sociedade”</i> Palestrante: Conselheiro Wolmar Alipio Severo Filho
14:00h-16:00h	Miniconferências e Sessões Coordenadas
Sala 310	Ensino de Química/ Extensão Palestrante: Prof. Dr. Maurícius Selvero Pazzinatto (UFRGS) <i>“Explorando possibilidades de Metodologias Investigativas e Centradas no Estudante no Ensino da Química”</i> EDU 001; EDU 007; EDU 013; EDU 021; EDU 026
Sala 300	Físico-Química/Química de Materiais Palestrante: Profa. Dra. Adriana Passarella Gerola (UFSC) <i>“Química supramolecular no desenvolvimento de materiais inteligentes: da Catálise à medicina”</i> FSQ 046; FSQ 017; FSQ 032; FSQ 014; FSQ 002
Anfiteatro (Sala A)	Química Analítica e Ambiental Palestrante: Profa. Dra. Lucélia Hoehne (Univates) <i>“Determinação de Selênio em Bactérias ácido lácticas (BALs) e aplicações no ramo alimentício”</i> ANA 023; ANA 029; ANA 041; ANA 065; ANA 081
Sala 308	Química Inorgânica Prof. Dr. Bernardo Almeida Iglesias (UFSC) <i>“Química dos Corróis - O início em terras brasileiras”</i> INO 009; INO 013; INO 020; INO 021
Sala 602	Química Orgânica Palestrante: Prof. Dr. Tiago Elias Allievi Frizon (UFSC) <i>“Materiais Funcionais, Compostos Bioativos e Sustentabilidade, os desafios para a consolidação de pesquisa aplicada em campus universitário”</i> ORG 034; ORG 043; ORG 052; ORG 068; ORG 071
16h-16:30h Hall do prédio da FAEM	Coffee break
16:30h-17:30h Auditório da FAEM	Plenária 4 Prof. Dr. Éder João Lenardão (UFPEL) <i>“20 anos de Química Verde na UFPEL. Síntese orgânica e formação de recursos humanos”</i>
17:30h-18:30h Auditório da FAEM	Cerimônia de Encerramento



SBQ SUL

29º Encontro de Química da Região Sul

Um olhar para o futuro

QUÍMICA ANALÍTICA

Sessões Coordenadas

19 de outubro (Quinta-feira) - Anfiteatro (Sala A)

	Palestrante: Prof. Dr. Eliezer Quadro Oreste (FURG) “Desenvolvimento de sensores a partir de materiais alternativos”
ANA 005	Avaliação do uso de cloreto de ferro (III) para a remoção de fósforo de efluente. <u>Gabrielle Dias Pereira (IC)</u> , Ana Barbosa Vianna (PG), Viviane L. Garcia (IC), Valderi Luiz Dressler (PQ) - UFSM
ANA 008	Fluxo de trabalho para a detecção de produtos de transformação da cafeína e atenolol por “suspect screening” utilizando LC-QTOF-MS e critérios de Schymanski. <u>Giséle Prado da Rosa (PG)</u> , Nicole H. Lazzari (PG), Vitor M. Nilson (IC), Tânia Mara Pizzolato (PQ), Mariana R. Gama (PQ) - UFRGS
ANA 017	Caracterização de méis de <i>Apis melífera</i> por meio de análise de componentes principais. <u>Vitor G. Foltz (IC)</u> , Mariana A. Xavier (IC), Victor L. R. Pinheiro (PG), Juliana Ferreira (PG), Marcela Boroski (PQ), Cleber A. Lindino (PQ) - UNIOESTE
ANA 052	Determinação de Na, K, Ba e Pb em méis de abelhas dos gêneros <i>Melipona</i> e <i>Apis Mellifera</i> por Espectrometria de Emissão Óptica com Plasma Induzido por Micro-ondas. <u>Mariana Moreira Cunha (IC)</u> , Charlie G. Gomes (PG), Mariana A. Vieira (PQ) - UFPEL
ANA 061	Determinação da textura em solos utilizando a espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS) associada a métodos quimiométricos. <u>Jocelene Soares (PG)</u> , José G. L. Abich (IC), Gilson A. Helfer (PQ), Adilson B. da Costa (PQ) - UNISC

20 de outubro (Sexta-feira) - Anfiteatro (Sala A)

	Palestrante: Profa. Dra. Lucélia Hoehne (Univates) “Determinação de Selênio em Bactérias ácido lácticas (BALs) e aplicações no ramo alimentício”
ANA 023	Desenvolvimento de dispositivo ARDUINO/RGB de baixo custo para análise de íons cobre em água. Luan Diego Ramalho Arantes (IC), Mayara Aparecida Oribka (IC), Vitor Teles Correia (PQ), Marcos Eduardo Treter (PQ), <u>Tiago Andrade Chimenez (FM)</u> - IFC
ANA 029	Determinação de contaminantes emergentes em amostras de chorume. <u>Sthefanie Lopes do Valle (IC)</u> , Sergiane Caldas Barbosa (PQ), Verônica Simões de Borba (PQ), Jônatas Külzer (IC), Luciana Tavares de Oliveira (IC), Anna Carolina N.I Meireles (IC), Luiz Frederico Rodrigues (PQ), Ednei Gilberto Primel (PQ) - FURG
ANA 041	Nanopartículas de prata e ouro produzidas partir de extratos de <i>E. hiemale</i> e <i>M. glomerata</i>: Potencial aplicação como sensores colorimétricos para determinação de metais. <u>Bruno Sana (IC)</u> , Morgana L. da Rocha (PG), Eduardo S. Chaves (PQ) - UFSC
ANA 065	Avaliação de suplementos proteicos através da determinação elementar por MIP OES e análise exploratória de dados. <u>Jéssica da R. Porto (PG)</u> , Yasmin R. Bloedorn (PG), Charlie G. Gomes (PG), Daisa H. Bonemann (PG), Anderson S. Ribeiro (PQ) - UFPEL
ANA 081	Estudo da distribuição de cádmio e cobalto em frações de águas estuarinas empregando Voltametria de Redissolução. <u>Kasley Barreto (IC)</u> , Leandro Machado de Carvalho (PQ); Cristina Ramos Trindade (PG) - UFSM

Sessão de Pôsteres

ANA 001	Análise do teor de Hg em multivitamínicos por FI-CV-ICP-MS: Desenvolvimento metodológico e avaliação de risco toxicológico. Viviane Lopes Garcia (IC), Ana B. Viana (PG), Cristiane Pappis (PG), Gabrielle Dias Pereira (IC), Valderi L. Dressler (PQ) - UFSM
ANA 002	Avaliação de sensor de turbidez para determinação de potássio disponível em solo. Juliana Danda Wille (IC), Ana B. Viana (PG), Cristian K. Pereira (PG), Valderi L. Dressler (PQ) – UFSM
ANA 003	Contaminação por mercúrio em diferentes espécies de peixes do Rio Madeira: alerta à saúde humana. Adrean Arruda Macedo (IC), Ana Barbosa Viana (PG), Cristiane Pappis (PG), Flávia Hanzel Brito (PG), Viviane Lopes Garcia (IC), Valderi Luiz Dressler (PQ) - UFSM
ANA 004	Análise de metais tóxicos ao redor de curtume desativado. Diogo Marth (IC), Ieda Das Neves Caetano (IC), Ana Flávia P. Gomes (IC) , Gabriela P. Tomaz (IC) , Pedro José S. Filho (PQ) - IFSUL
ANA 006	Desenvolvimento de sistema FI-CVG-ICP-MS para determinação de mercúrio. Ana Barbosa Viana (PG), Cristiane Pappis (PG), Cristian Kelling Pereira (PG), Flávia Hanzel Brito (PG), Viviane L. Garcia (IC), Arthur Felipe Burg (IC), Dylan M. Hoffmann (IC), Valderi Luiz Dressler (PQ) - UFSM
ANA 007	Efeito da filtração na determinação de filtros UV em esgoto doméstico por LLE - GC/MS. Ana Paula Stefanelo e Silva (PG), Maria Alice Farias da Silva Amaral (IC), Gabriel Milton Gonçalves da Silva (IC), Mirian Dosolina Fusinato (PG), Pedro José Sanches Filho (PQ) - IFSUL
ANA 009	Desenvolvimento de um método MSPD assistido por vórtex para extração de HPAs de camarão e determinação por GC-MS/MS. Anna C. N. Meireles (IC), Sergiane C. Barbosa (PQ) , Larine Kupski (PQ) , Verônica S. de Borba (PQ) , Jônatas Külzer (IC) , Sthefanie L. do Valle (IC) , Ednei G. Primel (PQ) , Jean L. O. Arias (PQ) - FURG
ANA 010	Otimização das Condições de Preparo de Amostra para Determinação de Contaminantes de Processamento em Alimento Infantil por HPLC-DAD. Verônica Simões de Borba (PQ), Sthefanie Lopes do Valle (IC), Luciana Tavares de Oliveira (IC), Anna Carolina Nickel Meireles (IC), Jônatas Külzer (IC), Sergiane Caldas Barbosa (PQ), Larine Kupski (PQ), Ednei Gilberto Primel (PQ) - FURG
ANA 011	Determinação da concentração total e da bioacessibilidade de B, Ba e Zn em castanhas e nozes por MIP OES. Catarine Cavada (PG), Caroline D. Clasen (PG), Clarissa M. Moreira dos Santos (PQ), Mariana A. Vieira (PQ) - UFPEL
ANA 012	Estudo da ocorrência de produtos farmacêuticos e de higiene pessoal em águas da cidade de Rio Grande/RS. Luciana T. Oliveira (IC), Sergiane C. Barbosa (PQ), Estefani P. Rosa (IC), Sthefanie L. Valle (IC), Jônatas Külzer (IC), Manuel Cezar M. B. N. Souza (PQ), Veronica S. Borba (PQ), Ednei Gilberto Primel (PQ) - FURG
ANA 013	Desenvolvimento de uma Cerveja de Baixo Teor Alcoólico Estilo International Pale Lager: Avaliação do Teor Alcoólico e Degustativo Através da Técnica da Língua Eletrônica. Kleiton Eduardo da Silva (PG), Endler Marcel Borges de Souza (PQ) e Paulo Cesar de Jesus (PQ) - FURB
ANA 014	Desenvolvimento de um método de preparo de amostras para análise elementar em vinhos por MIP OES. Charlie G. Gomes (PG), Daisa H. Bonemann (PG) , Jessica da R. Porto (PG), Yasmin R. Bloedorn (PG) , Mariana M. da Cunha (IC), Mariana A. Vieira (PQ) - UFPEL
ANA 015	Técnicas voltamétricas para identificação e caracterização de grupos glicóis por meio do eletrodo Cu/CuO. Emily Clara Aguiar Welter (IC), Giovana Gomes Porn (IC), Cleber Antônio Lindino (PQ) – UNIOESTE

ANA 016	<i>O uso da espectroscopia na região do UV-vis para a obtenção do perfil espectral comparativo de uísques originais e falsificados.</i> Victoria Borges Vaz de Leon (IC), Bruna Orlando Corrêa (IC), Bruna Pereira de Lima (IC), Taís Poletti (PG), Diogo La Rosa Novo (PQ), Carla de Andrade Hartwig (PQ) - UFPEL
ANA 018	<i>Determinação de Oxalato em Amostras de Arroz Polido e Integral Comerciais de Cultivo Convencional e Orgânico.</i> Letícia C. Rios (IC), Krystopher B. Krammer (IC), Juliana M. Dias (PG), João B. S. Espinelli Junior (PQ), Sergiane C. Barbosa (TC), Ednei Gilberto Primel (PQ), Rodolfo Carapelli (PQ) - FURG
ANA 019	<i>Resíduo de cromo corporal e em diferentes partes do pacu (Piaractus mesopotamicus) após um ensaio de digestibilidade.</i> Rafaela Mocoichinski Gonçalves (PG); Patricia da Silva Dias (PG); Jailson Novodworski (PG); Émerson José Alves Matos (PG); Leda Maria Saragiotto Colpini (PQ); Fábio Meurer (PQ) - UFPR
ANA 020	<i>Análises exploratórias da metabolômica e da comunidade microbiana do nattô utilizando espectrometria de massas.</i> Britney S. Toyama (PG), Alef dos Santos (PG), Felipe de O. Souza (PG), Vitor H. G. Murakami (IC), Eduardo J. Pilau (PQ) - UEM
ANA 021	<i>Determinação de ácidos graxos em esgoto bruto doméstico.</i> Fernanda Vasconcelos Telechi (PG), Ana Paula Stefanelo e Silva (PG), Gabriele Duarte Ferreira (PG), Jessica Etcheverria do Prado Hartwing (PG), Pedro José Sanches Filho (PQ) - IFSUL
ANA 022	<i>Contaminação por agrotóxicos no Bioma Pampa: desenvolvimento, validação e aplicação de método de análise em amostras de água da região.</i> Magali Kemmerich (PQ), Carlos Borges Filho (TC), Gabriele do Carmo (TC) - UNIPAMPA
ANA 024	<i>Efeito do pH na sorção de Rodamina B em biocarvão de casca de arroz.</i> Sedami T. R. Agassin, Mirlene P. Vitorino, Alexandre T. Paulino - UDESC
ANA 025	<i>Determinação de metais e não metais em biomassa vegetal e bioetanol (1G e 2G) por espectrometria de absorção atômica/molecular e o uso de ferramentas quimiométricas.</i> Leandro Kolling (PQ), Ágata L. G. da Silva (IC), Ana Laura Neumann (IC), Morgana B. Dessuy (PQ), Márcia M. da Silva (PQ), Maria Goreti R. Vale (PQ), Jailson B. de Andrade (PQ) - UFRGS
ANA 026	<i>Identificação de produtos de transformação de ATZ, CPZ, e SMX gerados em processos oxidativos avançados utilizando metodologia baseada em suspect screening.</i> Vitor Mumbach Nilson (IC), Suzan Zilli (PG), Salatiel Wohlmuth da Silva (PQ), Tânia Mara Pizzolato (PQ) - UFRGS
ANA 027	<i>Efeito da etapa de purificação na porosidade do Biochar - Extração Soxhlet vs Ultrassom.</i> Maria Alice Farias da Silva Amaral (IC), Ana Paula Stefanelo e Silva (PG), Christiane Lopes Leite (IC), Mirian Dosolina Fusinato (PG), Pedro José Sanches Filho (PQ) - IFSUL
ANA 028	<i>Determinação por GC-MS de compostos orgânicos no resíduo da borra de neutralização no controle do processo de destilação numa indústria produtora de óleo de arroz.</i> Diego Gil de los Santos (FM), Pauline K.Oliveira (PQ), Adriano G. Spessato (PQ), Gabriela R. L. Mendes (PQ), Pedro J. Sanches (FM) - IFSUL
ANA 030	<i>Determinação de contaminantes emergentes em frutos do mar.</i> Jônatas Külzer (IC), Paula Lima (IC), Sergiane C. Barbosa (PQ), Lucas Marcolin (PG), Anna Carolina Meireles (IC), Sthefanie do Valle (IC), Luciana T. Oliveira (IC), Verônica S. Borba (PQ), Ednei G. Primel (PQ) - FURG
ANA 031	<i>Análise de crisina em folhas, polpa e casca de Passiflora caerulea por método QuEChERS modificado e HPLC-DAD.</i> Carlos Borges Filho (PG), Magali Kemmerich (PQ), Cristiano Ragagnin de Menezes (PQ), Caroline Tuchtenhagen Rockembach (PQ) - UNIPAMPA
ANA 032	<i>Estabelecimento de método para determinação de hormônios e fármacos em água por SPE e UHPLC-MS/MS.</i> Caroline G. Ibarro (IC), Luana D. da Silveira (IC), Júlia A. de Oliveira (PG), Osmar D. Prestes (PQ), Martha B. Adaime (PQ), Renato Zanella (PQ) - UFSM

ANA 033	Proposta de Filtros de Cinzas de Casca de Arroz: um Caminho para a Purificação da Água. Patricia da R. Lira (PG), Paola Lira (PG), Jacson Menezes (PQ), Chiara Valsecchi (PQ) - UNIPAMPA
ANA 034	Degradação de Venlafaxina via ozonização assistida por ultrassom. Renata Vieira (IC), Luana Formagini (IC), Natália Rocha (IC), Gabriel Larruscahim (IC), Thiago Pereira (PG), Darliana Souza (PQ), Érico Flores (PQ) - UFSM
ANA 035	Hydrolysis of lipids in dairy wastewater using lipase incorporated in hydrogel. Amanda Magalhães das Neves (PG), Luiz Jardel Visioli (PQ), Heveline Enzweiler (PQ), Alexandre Tadeu Paulino (PQ) - UDESC
ANA 036	Desenvolvimento de método para a determinação de cl em biocarvão de biomassa lignocelulósica. Ana Luísa Seeger Machado (IC), Ana Luiza Garcia Mendes (PG), Alice Penteado Holkem (PG), Thalyta Fonseca da Silva (PG), Paola de Azevedo Mello (PQ) – UFSM
ANA 037	Determinação de Ferro em Cerveja por Espectrometria de Absorção Atômica por Chama após Microextração Líquido-Líquido Dispersiva. Addressa Danielli Weisbarch Villagram Martinez (PG), Maiuca Alberto Seco (PG), Eliana Torres Freitas Larruscain (PG), Jader Rodrigo Kappaun Silveira (PG), Rochele Sogari Picoloto (PQ), Fábio Andrei Duarte (PQ) - UFSM
ANA 038	Avaliação da presença dos compostos odoríferos 2-metilisoborneol e geosmina em água de abastecimento: monitoramento e estudo de caso em Porto Alegre – RS. Nicole Haas Lazzari (PG), Vitor M. Nilson (IC), Mariana R. Gama Sato (PQ), Tânia Mara Pizzolato (PQ) - UFRGS
ANA 039	Estudo do emprego de estrutura metal orgânica (MOF) composta por cluster de Zr (UiO-66) para o tratamento de águas residuais e adsorção de ácido p-arsanílico (p-ASA). Luan F. Passos (PG), Vinicius P. Gil (IC), Nicole P. Bins (IC), Diogo P. de Moraes (PQ) - UFRGS
ANA 040	Lixiviação assistida por ultrassom para recuperação de lantânio em catalisadores exauridos de processos de craqueamento catalítico fluidizado (FCC). Eloisa Tofolo Elicker (IC), Klaiani B. Fontana (PG), Tatiane de A. Maranhão (PQ), Elias P. F. Neto (PQ), Eduardo S. Chaves (PQ) - UFSC
ANA 042	Sensor amperométrico de glicose eletrocatalítico não enzimático baseado em eletrodo de grafite modificado com nanocompósito bimetálico rGO/NiMo(OH)₂. Mariana Booz (IC), Giancarlo Franzoi Guenther (PG), Eduardo G. Cividini Neiva (PQ), Daniela Brondani (PQ) - UFSC
ANA 043	Método Non-Targeted na Discriminação de Méis de Abelhas Nativas. Mariana A. Xavier (IC), Vitor G. Foltz (IC), Victor L. R. Pinheiro (PG), Renato Eising (PQ), Cleber A. Lindino (PQ) - UNIOESTE
ANA 044	Avaliação visual da mudança de ph no extrato de pitaya e análise da limpeza por UV-VIS e no modo full scan em GC-MS/MS. Antônio Miguel Gomes Lima (PG), Tainá Maria Saugo (PG), Pimperelli J. dos Santos (PG), Lenise G. de Oliveira (PQ), Márcia Helena S. Kurz (PQ), Osmar D. Prestes (PQ), Renato Zanella (PQ), Manoel Leonardo Martins (In memorian) (PQ), Fábio Ferreira Gonçalves (PQ) - FURG
ANA 045	Efeito do pH na sorção de Zn em água utilizando hidrogéis de pectina. Rizia Maria Raimondi (PG), Rafaela Barboza Torres (PG), Alexandre Tadeu Paulino (PQ) - UDESC
ANA 046	Termodinâmica de sorção de Rodamina B em biocarvão de casca de arroz. Mirlene Pereira Vitorino (PG), Sedami Tozoun Romain Agassin (PG), Alexandre Tadeu Paulino (PQ) - UDESC
ANA 047	Avaliação e Comparação Quantitativa de Propriedades Bioativas em Amostras de Microgreens e Vegetais Crescidos. Yasmin Ribeiro Bloedorn (PG), Daisa H. Bonemann (PG), Charlie Guimarães Gomes (PG), Sabrina H. Scherdien (PG), Adriane Medeiros Nunes (PQ), William Boschetti (PQ) e Anderson Schwingel Ribeiro (PQ) - UFPEL

ANA 048	Determinação voltamétrica de 17-β-estradiol utilizando eletrodo de carbono impresso de baixo custo modificado com quantum dots de grafeno. Juliana Costa Rolim (PG), Bruno Campus Janegitz (PQ), Roberto de Matos (PQ) Roberta A. Medeiros (PQ) - UEL
ANA 049	Voltametria de micropartículas imobilizadas aplicada a identificação eletroquímica de fármacos. Ana Paula de O. L. Inacio (PG), Flávio R. Sokal (PG), Géssica D. da Silveira (PQ), Daiane Dias (PQ) - FURG
ANA 050	Avaliação polimórfica por infravermelho do cloridrato de buspirona. Jéssika Adriane Janning (PG), Leticia Pezenti (PG), Renato Eising (PQ) - UNIOESTE
ANA 051	Uma breve revisão da análise de material particulado e dissolvido de ²²⁴Ra e ²²⁶Ra por técnicas radioanalíticas indiretas. Alessandra Gomes da Costa (PG), Cacinele Mariana da Rocha (PQ), Carlos F. F. de Andrade (PQ) - FURG
ANA 053	Eletrodo de filme confeccionado a partir de biochar de soja para determinação de cafeína por voltametria. Caroline Athaídes Miler, Juliana Martins Dias, Sara Alves da Cunha, Tito Roberto Sant'Anna Cadaval Junior, Luiz Antonio de Almeida Pinto, Daiane Dias - FURG
ANA 054	Fracionamento de compostos fenólicos em amostras de erva-mate (<i>Ilex paraguariensis</i>) orgânica e convencional. Juliana M. Dias (PG), Michele M. de Souza (TC), Rodolfo Carapelli (PQ) – FURG
ANA 055	Determinação de cobre em alimentos infantis empregando a dispersão da matriz em fase sólida e HR-CS FAAS. Lisliane Kickofel (PG), Kaiane de Quevedo Ribeiro (PG), Maiara Helena de Melo Malinowski (PG), Ana Cláudia Beduhn Luckow (PG), Cecília Ferreira da Silva (IC), Carlos Francisco Ferreira de Andrade (PQ), Bruno Meira Soares (PQ) - FURG
ANA 056	Validação de método analítico para determinação de aflatoxina B1 e ocratoxina A em fígado animal. Juliane Lima da Silva (PG), Alessandra Cimbalo (PQ), Luana Izzo (PQ), Jaqueline G. Buffon (PQ), Lara Manyes (PQ), Alberto Ritieni (PQ) - FURG
ANA 057	Determinação da concentração total de Al, Ca, Cr e Na em amostras de carnes vegetal Adryo Nobre Tavares (IC); Jéssica da Rosa Porto (PG), Kaiane de Quevedo Ribeiro (PG), Daisa Hakbart Bonemann (PG), Charlie Guimarães Gomes (PG), Anderson Schwingel Ribeiro (PQ) - UFPEL
ANA 058	Caracterização preliminar de compostos orgânicos no efluente de esgoto tratado em Pelotas-RS. Jéssica Etcheverria do Prado Hartwig (PG), Ana Paula Stefanelo e Silva (PG), Gabriele Duarte Ferreira (PG), Fernanda Vasconcelos Telechi (PG), Pedro José Sanches Filho (PQ) - IFSUL
ANA 059	Uso da voltametria em estado sólido e análise de componentes principais na distinção de adulterantes encontrados em amostras de cocaína. Sabine de A. Aquino (PG), Alexandre de M. Machado (TC), Cláudio M. P. de Pereira (PQ), Daiane Dias (PQ) - FURG
ANA 060	Determinação multielementar de metais em suplementos alimentares empregando a análise direta por HR-CS GF AAS. Odiane C. Balieiro (PG), Juliana C. Da Silva (IC), Morgana B. Dessuy (PQ) - UFRGS
ANA 062	Os resultados obtidos por CV-AAS são mesmo confiáveis? Avaliação de interferências química e espectral na determinação de mercúrio em sementes por CV-AAS. Gustavo Flores (IC), Leandro Kolling (PQ), Leandro dos Santos (PG), Morgana B. Dessuy (PQ) - UFRGS
ANA 063	Sorção de azul de metileno em hidrogéis de goma arábica. Carolina Lona (IC), Carolina Kuberesky (IC), Mirlene Pereira Vitorino (PG), Karine Priscila Naidek (PQ), Alexandre Tadeu Paulino (PQ) - UDESC
ANA 064	Cinéticas de sorção de azul de metileno em hidrogéis de quitosana. Carolina Kuberesky (IC), Carolina Lona (IC), Mirlene Pereira Vitorino (PG), Karine Priscila Naidek (PQ), Alexandre Tadeu Paulino (PQ) - UDESC

ANA 066	<i>Determinação direta de nitrogênio em tecido vegetal por espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS) associada a métodos quimiométricos.</i> Jocelene Soares (PG), Isadora C. M. Silva (IC), Luiza M. Grunvald (IC), José G. L. Abich (IC), Roberta O. Santos (PG), Gilson A. Helfer (PQ), Adilson B. da Costa (PQ) - UNISC
ANA 067	<i>Proposta de descarga de baterias de íon lítio para reciclagem por método eletroquímico.</i> Nicolas M. M. Barreto (IC), Vanessa A. Matias (TC), Marcus V. N. Simioni Filho (PQ), Rogério Corrêa (PQ), Albertina X. da R. Corrêa (PQ) - UNIVALI
ANA 068	<i>Determinação de bromo em polímeros espectrometria de absorção molecular de alta resolução com fonte contínua em forno de grafite (HR-CS GF MAS).</i> Rafaela Pirillo B. de Lima Piecas (IC), Ana Laura Neumann (IC), Leandro Kolling (PQ), Márcia Messias Silva (PQ) - UFRGS
ANA 069	<i>Identificação da adulteração de farinhas de larvas de insetos utilizando a espectroscopia no infravermelho (NIRS) associada a métodos quimiométricos.</i> Roberta O. Santos (PG), Daniela da C. e Silva (PG), Rafael M. da Silva (PQ), Andreas Kohler (PQ), Adilson B. da Costa (PQ) - UNISC
ANA 070	<i>Dispersão da matriz em fase sólida para análise de especiação de arsênio em algas comestíveis por LC-ICP-MS.</i> Ana Claudia B. Luckow (PG), Letícia C. Brudi (PG), Eliézer Q. Oreste (PQ), Fábio A. Duarte (PQ), Carlos F. F. de Andrade (PQ), Ednei G. Primel (PQ), Bruno M. Soares (PQ) - FURG
ANA 071	<i>Degradação de contaminantes emergentes por fotocatalise heterogênea utilizando catalisadores à base de Nióbio.</i> Martha Fogliato S. Lima (PQ), Leonardo R. Amaral (PG), Leonardo P. Pavan, Katia B. Gusmão (PQ), Anderson J. Schwanke (PQ), Mariana R. Gama (PQ), Tânia M. Pizzolato (PQ) - UFRGS
ANA 072	<i>Decomposição assistida por radiação micro-ondas utilizando H₂O₂ e posterior determinação de impurezas elementares em amostras de IFAs por ICP-OES.</i> Isadora Dornelles (IC), Jennefer Queiroz (IC), Cristian Pereira (PG), Aline Muller (PQ), Edson Muller (PQ) - UFSM
ANA 073	<i>Como monitorar íons sulfato em etanol combustível? Uma proposta simples usando a espectrometria de absorção molecular em forno de grafite pode ser a solução.</i> Ana Laura Neumann (IC), Leandro Kolling (PQ), Márcia M. da Silva (PQ) - UFRGS
ANA 074	<i>Determinação de metais em amostras do rio Piratini via MIP OES.</i> Lucas Lucena Ferreira (IC), Yasmin R. Bloedorn (PG), William Boschetti (PQ), Anderson S. Ribeiro (PQ) - UFPEL
ANA 075	<i>Determinação de níveis de cobre em amostras de sedimentos por espectroscopia de absorção atômica.</i> Michele Espinosa da Cunha (PQ), Adriano Batista Souza (IC), Pedro Figueiredo da Silva (IC), Veridiana Krolow Bosenbecker (PQ), Pedro Jose Sanches Filho (PQ) - IFSUL
ANA 076	<i>Análise comparativa de métodos para a obtenção de Hidroxiapatita a partir das escamas da sardinha.</i> Camilly Cristina S. da Luz (IC), Natacha N. Biaotobock (IC), Vanessa A. Matias (TC) Albertina X. da Rosa Correa (PQ) - UNIVALI
ANA 077	<i>Identificação de nanopartículas de dióxido de silício em amostras de suco em pó por microscopia eletrônica de varredura.</i> Jennefer Queiroz (IC), Edson Müller (PQ), Aline Müller (PQ), Cristian Pereira (PG), Isadora Dornelles (IC) - UFSM
ANA 078	<i>Determinação de metais em creme de leite por espectrometria de emissão óptica com plasma induzido por micro-ondas.</i> Karine Flores Vilke (IC), Nicolle L. Bandeira (IC), Yasmin R. Bloedorn (PG), Jéssica da R. Porto (PG), Charlie G. Gomes (PG), Anderson S. Ribeiro (PQ), Adriane M. Nunes (PQ) - UFPEL
ANA 079	<i>Avaliação de um método de preparo de amostras para a decomposição de azeite de oliva e determinação de elementos terras raras por USN-ICP-MS.</i> Camila A. André (IC), Bruno Oliveira Poletto (PG); Vanessa R. Nascimento (PG), Cezar A. Bizzi (PQ), Erico M. M. Flores (PQ), Jussiane S. Silva (PQ) - UFSM

ANA 080	<i>Determinação da concentração total de Ba, Cu, K e Mn em hambúrgueres processados por Espectrometria de emissão óptica com plasma induzido por micro-ondas (MIP OES).</i> Nicolle L. Bandeira (IC), Jéssica da R. Porto (PG), Yasmin R. Bloedorn (PG), Daisa H. Bonemann (PG), Charlie G. Gomes (PG), Anderson S. Ribeiro (PQ) - UFPEL
ANA 082	<i>Determinação de halogênios e enxofre em amostras de chá.</i> Larissa C. A. Costa (PG), Maria Eduarda B. Kruger (G), Filipe S. Rondan (PQ), Jenifer H. Cerqueira (PG), Márcia F. Mesko (PQ) - UFPEL
ANA 083	<i>Avaliação da concentração de elementos potencialmente tóxicos em fluidos utilizados na perfuração de poços de petróleo por ICP-MS.</i> Thiago Laurentino Rial (IC), Eduardo S. Chaves (PQ) - UFSC
ANA 084	<i>Análise elementar em patê industrializado de origem animal por MIP OES.</i> Ana Paula M. de Oliveira (IC), Nicolle L. Bandeira (IC), Jéssica da R. Porto (PG), Yasmin R. Bloedorn (PG), Daisa H. Bonemann (PG), Charlie G. Gomes (PG), Adriane M. Nunes (PQ), André R. Fajardo (PQ), Anderson S. Ribeiro (PQ) - UFPEL
ANA 085	<i>Método de microextração simultâneo baseado em solvente supramolecular de para determinação de pesticidas em amostras de águas e farinhas.</i> Luciane Effting (PG), César R. T. Tarley (PQ) - UEL
ANA 086	<i>Análise termogravimétrica do caroço de pêsego.</i> Kowalski, Erika R. S.; Castro, Fábio P. S. (PG); Timm, Élita H. (PG); Sanches Filho, Pedro J. (PQ); Barwald, Giani M. B. (PQ) - IFSUL
ANA 087	<i>Avaliação Forense da Falsificação de Medicamentos Suplementares à base de Ferro através da Espectrometria de Absorção Molecular na Região do Ultravioleta e Visível.</i> Jhulyana Campos Cardoso (IC), Taina Fernanda Barbosa Nunes (IC), Carla Andrade Hartwig (PQ), Diogo La Rosa Novo (PQ) - UFPEL
ANA 088	<i>Determinação de níquel em suspensões de cacau em pó por espectrometria de absorção atômica em forno de grafite.</i> Rodrigo Canarin de Oliveira (IC), Renata Nascimento Caetano (PG), Daniel L. G. Borges (PQ) - UFSC
ANA 089	<i>Estudo da reação de quimiluminescência do Luminol® como teste presuntivo na detecção de vestígios de sangue: avaliação das substâncias interferentes e tipos de superfícies.</i> Júlia Collares dos Santos (IC), Eduardo Grill da Silva Carvalho (PG), Camilly Vitória Werner Thurow (IC), Chaiani Battisti (IC), Clarissa Marques Moreira (PQ) - UFPEL
ANA 090	<i>Comparação das quantidades dos grupos funcionais detectados na superfície das turfas TDF e FSF.</i> Bruna Pauletto Szpoganicz (PG), Bruno Szpoganicz (PQ) - UFSC
ANA 091	<i>Avaliação de colágeno em alimentos por análise direta de sólidos usando a espectrometria de fluorescência molecular.</i> Larissa Ramos Lima (IC), Eliézer Quadro Oreste (PQ), Juliano Carvalho Ramos (PQ) - FURG
ANA 092	<i>Desenvolvimento de método para determinação de triclosan em águas ambientais.</i> Alice Rosa da Silva (ICJ), Mariana Formagio (IC), Antônio Miguel Gomes Lima (PG), Lenise Guimarães de Oliveira (PQ), Márcia Helena Scherer Kurz (PQ), Fábio Ferreira Gonçalves (PQ) - FURG
ANA 093	<i>Propriedades Químico-Mecânicas de Vidros Produzidos com A Cinza da Casca de Arroz.</i> Matheus Ramalho Chim (PG), João Manoel Martins Marçal (IC), Jacson Weber de Menezes (PQ), Chiara Valsecchi (PQ) - UNIPAMPA

Análise do teor de Hg em multivitamínicos por FI-CV-ICP-MS: Desenvolvimento metodológico e avaliação de risco toxicológico.

Viviane Lopes Garcia^{1*} (IC), Ana Barbosa Viana¹ (PG), Cristiane Pappis¹ (PG), Gabrielle Dias Pereira¹ (IC), Valderi Luiz Dressler¹ (PQ). E-mail do autor: viviane.lopes@acad.ufsm.br

¹Universidade Federal de Santa Maria.

Palavras Chave: (Mercúrio, L-cisteína, Multivitaminas, FI-CV-ICP-MS).

Introdução

A absorção de nutrientes é fundamental para o funcionamento adequado do corpo humano devido à sua interação intrínseca com as atividades metabólicas e enzimáticas, porém muitos não conseguem suprir essas necessidades mesmo com dieta equilibrada. Durante a pandemia de Covid-19, houve um aumento expressivo¹ no uso de multivitamínicos, impulsionado pela busca por hábitos saudáveis e pelo desejo de fortalecer o sistema imunológico. Com isso, é fundamental garantir um eficiente controle de qualidade desses produtos, incluindo a monitorização de possíveis elementos tóxicos, como o mercúrio (Hg), para prevenir contaminações que possam afetar essa categoria de produtos e a saúde de quem faz uso. A preocupação com uma possível intoxicação por mercúrio surge devido à sua natureza prejudicial para a saúde humana, dado o seu potencial de se acumular nos tecidos e causar potenciais danos ao sistema nervoso, rins e sistema cardiovascular.

A quantificação de elementos em matrizes sólidas, como multivitamínicos, requer altas temperaturas, mas é crucial considerar a volatilidade do Hg. Portanto, alternativas de extração têm sido exploradas na literatura², incluindo o uso de agentes quelantes, como a L-cisteína.

Este trabalho visa desenvolver um método de preparo de amostra para extração e posterior quantificação em multivitamínicos. O método proposto utiliza L-cisteína como agente extrator e combina injeção em fluxo com a geração de vapor frio acoplado a espectrometria de massa com plasma indutivamente acoplado (FI-CV-ICP-MS).

Resultados e discussão

Foram analisadas cinco amostras de multivitamínicos de diferentes marcas adquiridos em farmácias locais. O Hg foi extraído com 6,0 mL de solução de L-cisteína 1% (m/v) em 50 mg de amostra moída e deixando em repouso por 4 horas a 20°C. A quantificação foi realizada utilizando o sistema FI-CV-

ICP-MS. Utilizaram-se soluções de HCl a 1% (v/v) e NaBH₄ a 0,005% (m/v) para geração de vapor de Hg. A eficácia da extração foi medida comparando o Hg extraído usando L-cisteína com a concentração de Hg em amostras decompostas com ácido assistido por radiação de micro-ondas e pela análise de um material de referência certificado de solo. Após otimização do sistema, o método alcançou limites de detecção (LOD) e quantificação (LOQ) de 2 ng/g e 6 ng/g de Hg, respectivamente. Comparado ao método de micro-ondas, com LOD de 16 ng/g e LOQ de 48 ng/g de Hg, a L-cisteína foi eficaz na extração de Hg de multivitamínicos e solo.

Nenhuma das amostras analisadas excedeu o limite de ingestão semanal de Hg recomendado pela Organização Mundial da Saúde (OMS)², que é de 4,0 µg kg⁻¹ de peso corporal, conforme dados apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Ingestão de mercúrio calculada a partir do consumo dos multivitamínicos recomendados pelo fabricante.

Amostra	Hg (ug / semana)
A	0,773±0,068
B	0,014±0,002
C	0,076±0,017
D	0,196±0,063
E	0,063±0,051

Conclusões

Este estudo desenvolveu e validou um método sensível para determinação de Hg em multivitamínicos via FI-CV-ICP-MS. O método revelou níveis dentro dos limites da OMS, indicando precisão na quantificação do Hg nos produtos. Embora com análise limitada a cinco amostras, os resultados destacam a importância de monitorar contaminantes nesses produtos para aprimorar a segurança em sua fabricação e consumo.

Referências e notas

- (1) ABIAD: Associação Brasileira da Indústria de Alimentos para Fins Especiais. Hábitos de Consumo de Suplementos Alimentares. [\[bit.ly/445VVy8\]](https://bit.ly/445VVy8) Acesso em agosto 2023.
- (2) Matusiewicz, H.; Sturgeon, R. E.; Appl. Spectrosc. Rev. 2012, 47, 41. [\[bit.ly/3YtPUdA\]](https://bit.ly/3YtPUdA)
- (3) OMS: Organização Mundial da Saúde. [\[bit.ly/3DSl8S5\]](https://bit.ly/3DSl8S5). Acesso em agosto 2023.

Avaliação de sensor de turbidez para determinação de potássio disponível em solo

Juliana Danda Wille^{1*} (IC), Ana Barbosa Viana¹ (PG), Cristian Kelling Pereira¹ (PG), Valderi Luiz Dressler¹ (PQ). E-mail: juliana.wille@acad.ufsm.br*

¹Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), Campus de Camobi, Departamento de Química, Santa Maria, 97.105-900, RS.

Palavras Chave: Solo, Extração, Potássio, Turbidimetria.

Introdução

O potássio (K) é um nutriente que tem grande influência na qualidade da cultura e sua eficiência produtiva, pois tem diversas funções nas plantas, principalmente, relacionadas ao controle da pressão osmótica. Além de impactar nas atividades enzimáticas, sua deficiência acarreta em uma maior geração de espécies reativas de oxigênio. As plantas absorvem o K do solo e, devido a isso, é importante avaliar a quantidade de K disponível. Para quantificar o K disponível no solo, o método mais utilizado é por extração seletiva, onde são usadas soluções extratoras que irão deslocar a fração de K que está adsorvida às superfícies negativas da argila e matéria orgânica presente no solo. Diversas soluções extratoras estão disponíveis e que se baseiam em diferentes mecanismos para deslocar o K. A solução de Mehlich-1 é mais utilizadas no Brasil. A determinação do K no extrato, geralmente, é realizada por espectrometria de emissão atômica.^{1,2} Entretanto, visando estabelecer um método de mais baixo custo e a portabilidade, neste trabalho foi investigado método turbidimétrico para a determinação de K utilizando sensor de turbidez portátil

Resultados e discussão

Para a quantificação do K disponível em solo, avaliou-se o tempo de extração, massa de solo utilizada e a solução extratora. Como solução extratora foi testada solução de Mehlich-1, solução de Mehlich-1 e água. Para a determinação de K pelo método turbidimétrico, avaliou-se o uso do reagente tetrafenilborato de sódio a 3% (m/v), seu volume e o tempo de formação do precipitado. As condições encontradas para o método de extração de K disponível foram: 10 minutos de extração, 0,5 g de solo e solução de Mehlich-1 diluída. Com água a extração de K dos solos testados foi inferior à 30% quando comparado as soluções concentrada e diluída de Mehlich-1. A determinação de K por turbidimetria foi feita usando 2 mL do reagente precipitante com tempo de precipitação ideal de 25 min. Os resultados indicam a viabilidade de se utilizar o sensor turbidimétrico portátil para a determinação de K

em solo. A curva de calibração tem boa linearidade utilizando na faixa de 0 a 10 mg L⁻¹ de K. Além disso, o método turbidimétrico proposto para a determinação de K na amostra A (Tabela 1) tem resultados com boa concordância com os resultados obtidos por fotometria por emissão atômica (F AES), indicando a boa robustez do método.

Tabela 1 – Concentração de K extraído do solo.

Amostra	K extraído, mg kg ⁻¹
A	109*
B	38
C	107

*Valor obtido utilizando 1,0 g de amostra.

Conclusões

De acordo com os resultados obtidos, o uso da solução Mehlich-1 pode ser substituída pela solução diluída 1 + 1, diminuindo a quantidade de reagentes. Entretanto, observou-se uma baixa eficiência de extração de K com água. Com isso, o extrato final é menos ácido, facilitando a aplicação do método turbidimétrico. Ademais, os resultados obtidos pelo método turbidimétrico são próximos (concordância de 95%, teste t) daqueles obtidos por F AES, sendo possível obter curvas de calibração com boa linearidade de até 10 mg L⁻¹ de K. Assim sendo, o uso de sensor de turbidez demonstrou potencial para a aplicação proposta neste trabalho.

Agradecimentos

CNPq, FAPERGS.

Referências e notas

- (1) Teixeira, P. C. *et al.* Manual de Métodos de Análise de Solo. 3. ed. Brasília: Embrapa, 2017.
- (2) Karrman, K.J.; Bladh, E.; Gedda, P.O. Turbidimetric ultramicro titration of potassium. *Microchim. Acta*, **1959**, 47, 779.

Contaminação por mercúrio em diferentes espécies de peixes do Rio Madeira: alerta à saúde humana

Adrean Arruda Macedo¹ (IC), Ana Barbosa Viana¹ (PG), Cristiane Pappis¹ (PG), Flávia Hanzel Brito¹ (PG), Viviane Lopes Garcia¹ (IC), Valderi Luiz Dresler¹ (PQ). *Ana.barbosa@acad.ufsm.br

¹Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), Campus de Camobi, Departamento de Química. Santa Maria, 97.105.-900, RS.

Palavras Chave: Mercúrio, contaminação, garimpo, peixe.

Introdução

O rio Madeira, localizado na cidade de Porto Velho, capital do estado de Rondônia, vem sendo contaminado por mercúrio (Hg), consequência do garimpo do ouro e outras atividades antropogênicas. A preocupação com o Hg vem do seu uso intensivo na exploração do ouro e, levando em consideração o ciclo biogeoquímico do Hg, que uma vez lançado no ambiente, o mesmo fica retido na água, sedimentos, nos peixes e outros compartimentos ambientais. Cabe destacar que há uma considerável população de ribeirinhos que utiliza o rio para a pesca, sendo o peixe um dos principais alimentos desta população.¹

Levando em consideração a toxicidade do Hg e que é nocivo à saúde humana, e que tem como características a bioacumulação e biomagnificação, o elemento pode ficar retido na cadeia alimentar dos peixes e aumentar a sua concentração conforme o nível trófico. Neste sentido, é importante mencionar que os peixes são a principal fonte de proteína dos ribeirinhos do rio Madeira. Portanto, o consumo de peixe contaminado é uma questão de saúde pública, justificando monitoramento dos níveis de concentração de Hg em peixes para averiguar se esses podem ser consumidos sem oferecer risco à saúde. Diante disso, a legislação brasileira estipula limites máximos para Hg em peixes, sendo $0,5 \mu\text{g g}^{-1}$ para espécies não predadora e $1,0 \mu\text{g g}^{-1}$ para espécies predadoras.^{2,3}

Resultados e discussão

Para a realização deste estudo foram coletadas 18 espécies de peixes do rio Madeira, no comércio local de Porto Velho – RO. Aproximadamente 5 g de músculo de cada espécie foram coletadas e anotadas as principais características, como comprimento, peso, espécie de escama ou couro, dentre os diferentes hábitos alimentar (herbívoros, piscívoros, carnívoros, onívoros e necrófagos). Após a coleta, as amostras foram mantidas à baixa temperatura até o momento do preparo para análise. O preparo das amostras foi realizado em sistema fechado, com ácido e aquecimento por radiação micro-ondas, com temperatura e pressão máxima de 250 °C e 80 bar,

respectivamente. A quantificação de Hg nos peixes foi por sistema de injeção em fluxo com geração de vapor frio acoplado a espectrometria de massa com plasma indutivamente acoplado (FI-CVG-ICP-MS). Das 18 espécies estudadas apenas em uma não foi detectado Hg e 4 estão dentro do limite permitido. Porém 13 amostras estão com níveis de Hg acima do limite permitido pela legislação vigente, ou seja, em concentração superior a $0,5 \mu\text{g g}^{-1}$ para espécies não predadoras e $1,0 \mu\text{g g}^{-1}$ para espécies predadoras, sendo, portanto, não recomendável o consumo destes peixes.

Conclusões

As concentrações de Hg presentes nos peixes são preocupantes, pois o consumo destes pode ter sério risco à saúde humana. Devido ao ciclo biogeoquímico do Hg e ao aumento da extração do ouro no Rio Madeira nos últimos anos, seria importante investigar sobre os níveis de Hg, nos sedimentos, água e na população ribeirinha. Desta forma, é possível verificar as relações existentes nas concentrações de Hg em peixe e verificar a bioacumulação e se ocorre biomagnificação no organismo humano.

Agradecimentos

CNPq

Referências e notas

- (1) Prazeres, L. **Garimpo na Amazônia: o que está por trás da invasão do rio Madeira | Amazonas. 2021.**
- (2) Bastos, W. R. et al. Mercury in fish of the Madeira river (temporal and spatial assessment), Brazilian Amazon. **Environmental Research, 2015**, 140, 191.
- (3) MINISTÉRIO DA SAÚDE. **Agência Nacional de Vigilância Sanitária - Dispõe sobre o regulamento técnico MERCOSUL sobre limites máximos de contaminantes inorgânicos em alimentos. RDC N° 42, de 29 de agosto de 2013.**

Análise de metais tóxicos ao redor de curtume desativado

Diogo Marth^{1*} (IC), Ieda Das Neves Caetano (IC), Ana Flávia Pinto Gomes (IC)¹, Gabriela Pinto Tomaz (IC)¹, Pedro José Sanches Filho (PQ)¹. diogo.str.marth@gmail.com

¹ Grupo de Pesquisa em Contaminantes Ambientais –GPCA-IFSUL- Campus Pelotas

Palavras Chave: Curtume, Contaminantes metálicos, Cromo, Contaminação

Introdução

A contaminação por íons metálicos é um importante objeto de estudo em ambientes naturais e regiões de habitação humana, haja em vista potenciais efeitos danosos decorrentes de sua ação em rotas metabólicas. Alguns metais podem ser essenciais a funções vitais, como o cobre (Cu) e o Zinco (Zn), e outros, não essenciais, como o cromo (Cr) e o chumbo (Pb), ambos os tipos com potenciais efeitos acumulativos ou tóxicos, se presentes em quantidade elevadas (1). Ademais, curtumes figuram entre as principais fontes de contaminação por cromo, já que, se não descartados corretamente, seus resíduos acumulam-se e podem ultrapassar concentrações estabelecidas por normas ambientais (2). Portanto, foram coletadas amostras de solo em oito pontos próximos a um curtume desativado em 1969 localizado no município de Rio Grande – RS, com o objetivo de verificar os níveis de Cu, Zn, Pb e, em especial, Cr, com o uso de um espectrômetro de absorção atômica.

Resultados e discussão

As amostras de solo foram secas a 60 °C pelo período de 48 horas. 2 g da fração granulométrica menor que 0,075 mm foram digeridas com 4 mL de água régia (3 HCl : 1 HNO₃), 4 mL de água ultrapura Milli-Q e 1 mL de HClO₄, (3). Os extratos, filtrados e avolumados a 25,0 ml, foram lidos em um espectrômetro de absorção atômica, assim como padrões e brancos. Os resultados em estão expressos na tabela 1.

Destacaram-se os maiores níveis de cromo e dos demais analitos nos pontos mais próximo do curtume (P4 e P5), os quais ultrapassam o limite de 75 mg/kg estabelecido pelo CONAMA (4). Também pode-se verificar que as recuperações (para o material de referência certificado) e precisão (a partir dos RSDs%) foram aceitáveis de acordo com INMETRO (5). Ademais, os limites de quantificação variaram de 0,07 mg·Kg⁻¹, para Pb, a 6,7 mg·Kg⁻¹, para Cr, e as recuperações, de 72,2%, para Zn, a 107,9%, para Cr.

Tabela 1. Níveis dos metais em mg·kg⁻¹ ± desvio padrão relativo (%) nos oito pontos analisados.

	P1	P2	P3	P4	P5	P6	P7	P8	VO ^a
Cu	5,7 ±8,9	8,7 ±6,0	1,6 ±2,4	14,0 ±18,3	17,5 ±17,3	2,0 ±9,1	5,0 ±6,6	1,6 ±15,3	60
Cr	35,1 ±18,6	27,3 ±7,1	15,7 ±8,8	105,1 ±15,0	679,1 ±16,5	13,0 ±1,4	46,8± 3,5	D	75
Pb	84,4 ±13,2	33,0 ±12,2	4,0 ±9,7	33,3± 11,5	48,1 ±16,2	8,2 ±8,9	50,2 ±5,6	5,4 ±17,7	72
Zn	32,5 ±8,9	80,6 ±1,7	15,1 ±29,0	52,1 ±9,4	63,9 ±9,9	8,5± 38,1	25,0 ±16,7	14,2 ±6,0	300

^a VO: Valores Orientadores (CONAMA)

Conclusões

Foram encontrados níveis de cromo considerados tóxicos nos pontos mais próximos ao curtume, mesmo mais de 50 anos após sua desativação, o que evidencia o possível impacto nocivo da atividade de tal indústria na região.

Agradecimentos

Agradecemos à PROPESP –IFSUL pela estrutura e financiamento.

Referências e notas

- (1) Vaghetti, J. C. P. Utilização de biossorventes para remediação de efluentes aquosos contaminados com íons metálicos *UFRGS – Instituto de Química*. **2009**.
- (2) De Freitas, T. C. M.; Melnikov, P. O uso e os impactos da reciclagem de cromo em indústrias de curtume em Mato Grosso do Sul, Brasil. *Eng. Sanit. Ambient.* **2006**, 11, 305.
- (3) Hortellani, M. A.; Sarkis, J. E. S.; Abessa, D. M. S.; Sousa, E. C. M., Avaliação da contaminação por elementos metálicos dos sedimentos do Estuário Santos – São Vicente. *Quim. Nova.*, 31(1): 10-19,2008
- (4) Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA). Resolução nº 420. 28 de dezembro de 2009.
- (5) Instituto Nacional de Metrologia. Qualidade e Tecnologia (INMETRO). Orientação sobre validação de métodos analíticos. DOQ-CGCRE-008. 2016.

Avaliação do uso de cloreto de ferro (III) para a remoção de fósforo de efluente.

Gabrielle Dias Pereira (IC)^{1*}, Ana Barbosa Vianna (PG)¹, Viviane Lopes Garcia (IC)¹, Valderi Luiz Dressler (PQ)¹.

*E-mail: diaspereiragabrielle@gmail.com

¹Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), Campus de Camobi, Departamento de Química. Santa Maria, 97.105-900, RS.
Palavras Chave: Efluente Doméstico, Fósforo, Cloreto de ferro (III)

Introdução

O fósforo (P) é um elemento químico essencial à natureza e à vida humana e é comumente encontrado em rochas fosfatadas.¹ Porém, quando o P está presente em altas concentrações pode ocorrer a eutrofização em mananciais aquáticos e problemas à saúde humana, como a hiperfosfatemia². Sendo assim, a legislação do Conselho Estadual do Meio Ambiente (CONSEMA)³ estabelece um limite máximo permitido de 4 mg L⁻¹ de P para a emissão do efluente ao corpo receptor. Assim sendo, o presente trabalho objetivou investigar a remoção de P de efluente doméstico com cloreto de ferro (III). As variáveis pertinentes ao processo (pH, tempo e concentração de Fe) foram estudadas e a determinação de P foi feita por espectrofotometria no visível (Vís).

Resultados e discussão

As amostras utilizadas neste trabalho são provenientes de três locais distintos: efluente bruto, reator aeróbio de uma estação de tratamento de efluente doméstico com lodo ativado (ETE) e efluente tratado na ETE. A eficiência da remoção de P foi feita num teste de jarro (Jar test), com seis cubas. Foram estudados o efeito do pH (pH natural do efluente, pH natural +1 e +2 unidades de pH) e a concentração de Fe. O pH natural do efluente é em torno de 7,0 e alcalinização foi feita com solução de cal a 10% m v⁻¹. A concentração de Fe, como cloreto de ferro (III), foi avaliada até 40 mg L⁻¹. O tempo foi mantido em 1 min com agitação a 120 rpm e 30 min a 30 rpm, após a adição da solução de Fe ou cal. Após este período foi observada a decantabilidade do lodo e alíquotas de 50 mL do sobrenadante (a 10 mm de profundidade na solução) foram coletadas para determinar a concentração de P total. As determinações de P foram feitas por espectrofotometria pelo método do molibdato de amônio e ácido ascórbico em pH 2,0, ajustado com ácido sulfúrico. Como este método é específico para a determinação de ortofosfato, as amostras de efluente

foram submetidas à hidrólise ácida com ácido sulfúrico 30% e persulfato de amônio 20% sob ebulição durante um período de 40 min a fim de converter os compostos de P à ortofosfato. As soluções da curva de calibração e amostras foram ajustadas de forma que a condição final fosse similar. Tendo em vista o tratamento com altas concentrações de Fe, foi feito estudo para verificar a possível interferência na determinação de P. Para tal, foi adicionado o equivalente a 40 mg L⁻¹ de Fe a uma solução contendo 10 mg L⁻¹ de P. Nestas condições não foi verificada interferência do Fe. Os limites de detecção (LOD) e quantificação (LOQ) do método foram 0,015 e 0,045 mg L⁻¹ de P, respectivamente. Observou-se uma variabilidade na remoção de P do efluente em função do pH e da concentração de Fe, entretanto os melhores resultados foram observados quando o tratamento é feito em pH natural (próximo de 7,0) e com concentrações de Fe na faixa entre 5 e 40 ppm.

Conclusões

O processo utilizado para a remoção de P de efluente doméstico foi satisfatório, estando os valores de concentração de P de acordo com a concentração máxima permitida pelo CONSEMA (de 4 mg L⁻¹)³ para a liberação de efluentes em corpos hídricos. Desta forma, o uso do cloreto de ferro (III) pode ser indicado para esta finalidade, resultando, junto com as condições de pH, num processo viável, tanto em relação ao custo como sob o aspecto ambiental.

Agradecimentos

CNPq.

Referencias e notas

- (1) CHANG, Raymond; Química Geral: Conceitos Essenciais; 4ª ed.; São Paulo; McGraw-Hill; 2007.
- (2) WANG. Hyperphosphatemia in Chinese peritoneal dialysis patients with and without residual kidney function: what are the implications? American journal of kidney diseases: the official journal of the National Kidney Foundation, 43(4), 2022.
- (3) CONSEMA Resolução nº 355/2017

DESENVOLVIMENTO DE SISTEMA FI-CVG-ICP-MS PARA DETERMINAÇÃO DE MERCÚRIO

*Ana Barbosa Viana¹ (PG), Cristiane Pappis¹ (PG), Cristian Kelling Pereira¹ (PG), Flávia Hanzel Brito¹ (PG), Viviane Lopes Garcia¹ (IC), Arthur Felipe Burg¹ (IC), Dylan Mehler Hoffmann (IC), Valderi Luiz Dressler¹ (PQ). E-mail: *ana.barbosa@acad.ufsm.br

¹Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), Campus de Camobi, Departamento de Química, Santa Maria, 97,105-900, RS.

Palavras Chave: Mercúrio, FI-CVG- ICP-MS, peixe.

Introdução

O mercúrio (Hg) é um elemento tóxico que pode ficar retido no ambiente e na cadeia alimentar devido a sua biomagnificação e bioacumulação. Portanto, uma determinada concentração de Hg no organismo humano pode apresentar risco para a saúde, comprometendo o sistema nervoso e o funcionamento de alguns órgãos. Uma das formas de contaminação por Hg é a partir da ingestão de alimentos contaminados. Diversos estudos relatam a contaminação do rio Madeira, localizado em Porto Velho – RO, por Hg, o qual é utilizado para extração do ouro em garimpos¹. Deste modo, o consumo de peixe contaminado pode ser uma questão de saúde pública, justificando o desenvolvimento de métodos analíticos para monitorar os níveis de concentração do Hg em peixe. Neste sentido, foi desenvolvido um sistema de introdução de amostra com geração química de vapor acoplado a espectrometria de massa com plasma indutivamente acoplado, para determinação de Hg. Foram avaliadas as condições reacionais e físicas do sistema proposto.

Resultados e discussão

Foi desenvolvido um sistema de introdução de amostra em fluxo com geração de vapor químico acoplado a espectrometria de massa com plasma indutivamente acoplado para a determinação de Hg em tecido de peixe, com objetivo de utilizar o menor volume possível de reagentes e amostra, da ordem de μL . Além disso, visa-se um sistema de baixo custo. As variáveis químicas e físicas do sistema FI-CVG-ICP-MS para a geração de vapor químico de Hg foram otimizadas tendo-se em vista a obtenção da melhor razão sinal/ruído para o isótopo ^{202}Hg . Além disso, foram avaliados diferentes arranjos do sistema FI, principalmente em relação à mistura dos reagentes, tempos de acionamento das mini bombas peristálticas e diferentes modelos do separador gás/líquido. Em todas as otimizações foi usada uma solução de Hg^{2+} a

5 $\mu\text{g L}^{-1}$. Após avaliação das concentrações dos reagentes, para a obtenção das curvas de calibração foi utilizada uma solução de 0,005% (m/v) de NaBH_4 na presença NaOH em 0,1% (m/v), 1% (v/v) de HCl e uma vazão do Ar de 1,12 L min^{-1} . Com o sistema proposto os limites de detecção e quantificação foram 0,04 e 0,06 $\mu\text{g g}^{-1}$ respectivamente, com desvio padrão relativo inferior a 5%, coeficiente de correlação (R^2) da curva de calibração de 0,9999, o que mostra a boa resposta linear do sistema. Para avaliar a exatidão do método foi utilizado o CRM DOLT- 4, cuja decomposição foi feita nas mesmas condições das amostras. Foi aplicado tratamento estatístico, onde foi verificado que não houve diferença significativa entre os resultados obtidos e o resultado certificado para $p > 0,05$ (teste *t-student*). O método foi aplicado para amostra de peixe (músculo) e os resultados atendem os limites estabelecidos pela legislação vigente que estabelece 0,5 $\mu\text{g g}^{-1}$ para não espécies predadoras e 1,0 $\mu\text{g g}^{-1}$ para espécies predadoras.²

Conclusões

O sistema FI-CVG-ICP-MS proposto foi eficiente para determinação de Hg total nas amostras de peixes estudadas, pois o limite de quantificação para Hg de 0,06 $\mu\text{g g}^{-1}$, atende a concentração máxima estabelecida pela ANVISA em peixe. Além disso, o sistema proposto é de baixo custo e pode ser usado para análise de rotina.

Agradecimentos

Aos órgãos de fomentos em especial a CNPq.

Referencias

- (1) PESTANA, I. A. et al. Let's talk about mercury contamination in the Amazon (again): The case of the floating gold miners' village on the Madeira River. **The Extractive Industries and Society**, 2022.
- (2) Ministério da Saúde Agência Nacional de Vigilância Sanitária - Dispõe sobre o regulamento técnico MERCOSUL sobre limites máximos de contaminantes inorgânicos em alimentos: RESOLUÇÃO - RDC No 42, DE 29 DE AGOSTO DE 2013.

Efeito da filtração na determinação de filtros UV em esgoto doméstico por LLE - GC/MS

Ana Paula Stefanelo e Silva¹(PG)*, Maria Alice Farias da Silva Amaral¹ (IC), Gabriel Milton Gonçalves da Silva¹ (IC), Mirian Dosolina Fusinato¹(PG), Pedro José Sanches Filho¹(PQ).

¹ Instituto Federal Sul Rio-grandense -Pelotas/RS. *astefanelo@gmail.com

Palavras Chave: Contaminantes Emergentes, Filtração, Octocrileno, Oxibenzona

Introdução

A falta de saneamento básico é um dos obstáculos mais complexos que refletem na qualidade dos recursos hídricos naturais. Filtros Ultravioleta, como octocrileno (OC) e oxibenzona (OX) presentes em protetores solares, considerados contaminantes emergentes, possuem capacidade de passar pelos métodos tradicionais de tratamento de água, resultando em seu despejo junto do esgotamento sanitário em rios, lagos, repercutindo negativamente, tanto na biodiversidade, quanto na saúde e bem-estar públicos^{1, 2}. Na determinação destes compostos, metodologias analíticas envolvem etapas de filtração, pré-concentração, clean up, que podem influenciar diretamente no resultado final. Este estudo teve por objetivo avaliar influência da etapa previa de filtração na determinação dos níveis de octocrileno e oxibenzona, combinando LLE, derivatização e determinação por cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas (do inglês GC/MS) em amostra de esgoto doméstico .

Resultados e discussão

A mostras de esgoto foram coletadas na entrada da estação de tratamento de esgoto –Fragata-Pelotas –RS. As amostras, sem filtração e filtradas em papel de filtro qualitativo e foram submetidas a extração Líquido-Líquido, seguidas de derivatização por Sililação e determinação por GC/MS². Na figura 1 é possível observar que a etapa de filtração causou um efeito maior nos níveis OC que na OX . A situação demonstra que o OC (log Kow = 7,53) mais apolar, encontra-se associado principalmente ao material em suspensão quando comparado a OX (log Kow = 3,52), a qual não se observou diferença entre as amostras filtradas e sem filtração. Estes dados ilustram a dinâmica ambiental na distribuição dos contaminantes, para avaliação do

verdadeiro aporte destes, pela descarga de esgotos domésticos e canais de drenagem pluvial.

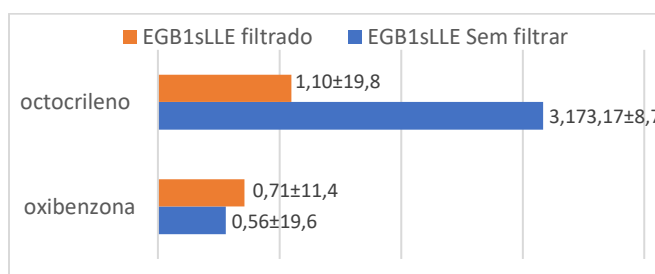


Figura 1: µg L⁻¹ ± % RSD octocrileno e oxibenzona

Conclusões

O estudo chama atenção que para avaliações seguras de alguns analitos, deve-se considerar estudos, tanto da fase dissolvida, quanto na adsorvida no material em suspensão, reflexo das propriedades físico-químicas do analito e da amostra. A partir deste estudo demonstra-se a importância que a filtração desempenha dentre as etapas metodológica, e sua relevância, durante a comparação entre resultados por diferentes metodologias em amostra ambientais, como esgoto doméstico.

Agradecimentos

IFSUL Campus Pelotas/RS; FAPERGS

Referencias e notas

- (1) Gago-Ferreiro, P.; Díaz-Cruz, M.S.; Barceló, D. Occurrence of multiclass UV filters in treated sewage sludge from wastewater treatment plants. *Chemosphere*. doi:10.1016/j.chemosphere.2011.04.003.
- (2) COLL, J. P. R. ; CUNHA, M. E ; AMARAL, M. A. F. S. ; PADILHA, M. C. ; SILVA, G. M. G. ; ARSAND, D. R. ; SANCHES FILHO, P.J . Evaluation of the effect of silylation in the development of an analytical method for the determination of UV filters and hormones by GC/MS. *Brazilian Journal of Analytical Chemistry - BrJAC (Print)*, 2023.

Fluxo de trabalho para a detecção de produtos de transformação da cafeína e atenolol por “suspect screening” utilizando LC-QTOF-MS e critérios de Schymanski

Giséle Prado da Rosa¹ (PG), Nicole Haas Lazzari¹(PG), Vitor Mumbach Nilson¹(IC), Tânia Mara Pizzolato¹(PQ), Mariana Roberto Gama¹(PQ).

¹Laboratório de Química Analítica e Ambiental (LQAA), Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS, Av. Bento Gonçalves, 9500 – Agronomia, Porto Alegre – RS. *E-mail: marianaroberto@gmail.com

Contaminantes emergentes, cafeína, Schymanski, produtos de transformação, espectrometria de massas e suspect screening.

Introdução

Os produtos de transformação (TPs) são compostos remanescentes da degradação química de compostos submetidos a processos específicos. Além da sua formação no ambiente, esses produtos podem ocorrer durante os Processos Oxidativos Avançados (POAs), os quais são utilizados em tratamento de água. A cafeína e o atenolol são importantes contaminantes emergentes (CEs). A cafeína tem distribuição mundial em fontes de água e solo agrícola, e devido a esta vasta distribuição e aos efeitos ambientais negativos aos ecossistemas, torna-se urgente a remoção da cafeína e seus derivados dos sistemas hídricos. Já o atenolol é um fármaco da classe dos β -bloqueadores amplamente utilizado na medicina para controle de doenças cardiovasculares. Com a utilização de espectrômetros de alta resolução, como o espectrômetro de massas com analisador de tempo de voo (QTOF-MS), é possível obter alta precisão e resolução de massa tornando possível a utilização de métodos de rastreamento, como o “suspect screening”, que se baseia em informações de massa exata, padrão isotópico e tempo de retenção. Os critérios de Schymanski buscam trazer confiança na identificação de moléculas desconhecidas, utilizando 5 níveis. Cada nível de confiança estabelece requisitos mínimos para que a identificação da molécula suspeita seja confiável⁽¹⁾. Neste trabalho, o objetivo foi desenvolver um fluxo de sequências avaliativas para serem utilizadas em dados obtidos por espectrometria de alta resolução com o modo de aquisição bbCID e o software TASQ[®] (Target Analysis Screening Quantification, Bruker) com a finalidade de identificar TPs de cafeína e atenolol, oriundos de diferentes processos de degradação.

Resultados e discussão

A primeira etapa consistiu no levantamento na literatura de TPs dos compostos de interesse. Tendo a massa exata dos íons moleculares, buscou-se o perfil de fragmentação em bibliotecas virtuais. As massas exatas

e a fórmula molecular do íon precursor e dos fragmentos mais abundantes foram armazenadas em uma tabela. A partir destas tabelas, os dados foram processados no software TASQ[®]. A avaliação do programa baseia-se em quatro parâmetros, são eles: massa exata (“M” < 5 ppm), tempo de retenção (“R”), mSigma (“S” < 50) e íons qualificadores (“Q” no mínimo 3 íons). O resultado da avaliação é dado por um sistema de cores, representado na etapa 4 da Figura 1.



Figura 1. Fluxo de trabalho para identificação de produtos de transformação utilizando o software TASQ.

Conclusões

O fluxo de trabalho adotado permitiu a análise por suspect screening de TPs da cafeína e atenolol, em diferentes matrizes, após serem submetidos ao processo de degradação fotocatalítica, ou apenas amostras ambientais passíveis de processos de degradação naturais, como a fotólise.

Agradecimentos

CAPES, CNPq e PPGQ – UFRGS, INOVA Cluster-FAPERGS

Referências e notas

- (1) SCHYMANSKI, E. L. et al. *Environmental Science & Technology*, v. 48, n. 4, p. 2097–2098, 18 fev. 2014.

DESENVOLVIMENTO DE UM MÉTODO MSPD ASSISTIDO POR VÓRTEX PARA EXTRAÇÃO DE HPAs DE CAMARÃO E DETERMINAÇÃO POR GC-MS/MS

Anna C. N. Meireles (IC)^{1*}, Sergiane C. Barbosa (PQ)¹, Larine Kupski (PQ)¹, Verônica S. de Borba (PQ)¹, Jônatas Külzer (IC)¹, Sthefanie L. do Valle (IC)¹, Ednei G. Primel (PQ)¹, Jean L. O. Arias (PQ)¹. *annacnmeireles@gmail.com

¹ Universidade Federal do Rio Grande - FURG, Laboratório de Análise de Compostos Orgânicos e Metais - LACOM, Rio Grande, Rio Grande do Sul, Brasil, 96203-900

Palavras Chave: HPAs; VA-MSPD; GC-MS/MS; Camarão; Frutos do mar.

Introdução

Os Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos (HPAs) são um grupo de compostos com 2 ou mais anéis aromáticos condensados, sendo resultantes da combustão incompleta de matéria orgânica e reconhecidos como cancerígenos e mutagênicos [1]. Devido à lipofilicidade, eles podem acumular nos tecidos comestíveis dos organismos aquáticos e, conseqüentemente, serem incorporados à dieta humana [2]. Desta forma, os camarões, que são os frutos do mar mais consumidos no mundo, podem ser uma fonte de contaminantes ambientais, incluindo HPAs [3]. Assim, a avaliação da concentração de HPAs em camarões é importante para garantir o consumo alimentar seguro.

Uma vez que o camarão é uma matriz complexa, rica em proteínas e lipídios, é necessária uma técnica analítica capaz de realizar a extração, limpeza e remoção de coextrativos antes da determinação cromatográfica. Portanto, este estudo teve como objetivo desenvolver um método analítico para extração de 16 HPAs prioritários utilizando VA-MSPD com determinação por GC-MS/MS.

Resultados e discussão

Foram avaliados diferentes solventes extratores (acetona, acetonitrila, acetato de etila e hexano) e suportes sólidos (C18, sílica, florissil, areia da praia e concha de mexilhão) na VA-MSPD quanto à exatidão (recuperação) e a precisão (RSD). Em geral, foram obtidas recuperações entre 84 a 129%, com RSD \leq 17% para o para todos os HPAs em estudo com todos os solventes de extração avaliados. O hexano foi selecionado como solvente extrator por apresentar melhores recuperações (85 a 113%), menor RSD (\leq 3,8%), melhor formato de pico e maior resposta cromatográfica.

Com relação à avaliação do suporte sólido, a sílica e o florissil apresentaram recuperações menores que o C18 e as recuperações entre o C18 novo e o C18 reutilizado foram diferentes estatisticamente. Já as recuperações com concha de mexilhão dourado e areia foram promissoras, porém, não tiveram capacidade de

remover coextrativos das amostras. Então, o C18 reutilizado foi selecionado por combinar grandes recuperações, alta remoção de coextrativos e gerar menos resíduo.

Por fim, foi realizado um experimento multivariado para otimizar as melhores quantidades de amostra, C18 reutilizado e hexano. Dessa forma, o método foi validado com as seguintes quantidades: 1,5 g de amostra liofilizada, 1 g de C18 reutilizado e eluição com 10 mL de hexano. O método otimizado será aplicado em amostras de camarão das cidades de Rio Grande e Pelotas, RS.

Conclusões

Um método simples, preciso e exato foi desenvolvido para a extração de HPAs de camarão por VA-MSPD, utilizando um suporte sólido reutilizado, pequenas quantidades de reagentes e amostras, e é realizada em número reduzido de etapas, sendo facilmente reproduzida em laboratórios com infraestrutura simples.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro fornecido pelas agências brasileiras FAPERGS (21/2551-0000684-6), CNPq e FINEP. E.G. Primel recebeu uma bolsa de pesquisa de produtividade da agência brasileira CNPq (DT 305716/2020-4). Os autores agradecem ao Centro Integrado de Análises pelas determinações cromatográficas.

Referências e notas

- (1) Escarrone, A. L. V.; Caldas, S. S.; Furlong, E. B.; Meneghetti, V. L.; Fagundes, C. A. A.; Arias, J. L. O.; Primel, E. G. Food chemistry, v. 146, p. 597-602, 2014.
- (2) Oliveira, M.; Portella, C. D. G.; Ramalhosa, M. J.; Delerue-Matos, C.; Sant'ana, L.; Morais, S. Food and Chemical Toxicology, v. 146, p. 111797, 2020.
- (3) Maia, M. L.; Paiga, P.; Ramalhosa, M. J.; Delerue-Matos, C.; Calhau, C.; Domingues, V. F. Bulletin of Environmental Contamination and Toxicology, p. 1-7, 2022.

Otimização das Condições de Preparo de Amostra para Determinação de Contaminantes de Processamento em Alimento Infantil por HPLC-DAD

Verônica Simões de Borba^{1*} (PQ), Sthefanie Lopes do Valle¹ (IC), Luciana Tavares de Oliveira¹ (IC), Anna Carolina Nickel Meireles¹ (IC), Jônatas Külzer¹ (IC), Sergiane Caldas Barbosa¹ (PQ), Larine Kupski² (PQ), Ednei Gilberto Primel¹ (PQ). *veronicasimoesborba@gmail.com

¹Laboratório de Análise de Compostos Orgânicos e Metais (LACOM), Escola de Química e Alimentos (EQA), Universidade Federal do Rio Grande (FURG), Campus Carreiros, Avenida Itália s/n km 8, CEP 96203-000, Rio Grande, Rio Grande do Sul, Brasil.

²Laboratório de Micotoxinas e Ciência de Alimentos (LAMCA), Escola de Química e Alimentos (EQA), Universidade Federal do Rio Grande (FURG), Campus Carreiros, Avenida Itália s/n km 8, CEP 96203-000, Rio Grande, Rio Grande do Sul, Brasil.

Palavras Chave: Acrilamida, Hidroximetilfurfural, Furfural, planejamento experimental, extração de contaminantes.

Introdução

Alimentos infantis ricos em carboidratos e proteínas podem propiciar a formação de contaminantes durante o processamento térmico como acrilamida (AA), 5-hidroximetilfurfural (HMF) e furfural (FF), que causam danos à saúde do consumidor (1). Logo, é importante monitorar estes compostos em alimentos de consumo infantil pois estes indivíduos são mais vulneráveis e sensíveis a toxinas, visto que seu sistema gastrointestinal ainda não está completamente desenvolvido e o menor peso corporal leva a maior ingestão de nutrientes e contaminantes (2).

Este estudo teve como objetivo otimizar um procedimento de extração simples para determinação simultânea de AA, HMF e FF por Cromatografia Líquida com detecção por Arranjo de Diodos (HPLC-DAD) em alimentos infantis.

Resultados e discussão

Para a otimização da extração, um delineamento composto central DCC 2³ adaptado do procedimento proposto por Shi et al. (3) foi realizado tendo como variáveis dependentes a quantidade de amostra (g), a proporção água:metanol (v/v) e o tempo de ultrassom (s) e como resposta as recuperações (R%) de AA, HMF e FF. A amostra utilizada nos ensaios foi um biscoito de milho infantil composto por 82,9% de carboidratos e 4,9% de proteínas. Os analitos foram determinados por HPLC-DAD utilizando condições pré-estabelecidas.

Entre os resultados obtidos no DCC 2³ (Figura 1), o ensaio 2 que utiliza 2 g de amostra, proporção 75:25 (água:metanol, v/v) sem a utilização de ultrassom foi escolhido pois apresentou R% dentro da faixa aceitável (70-120%) (4,5) e condições que tornam o método mais verde e econômico. Após, esta condição foi avaliada em triplicata, obtendo-se recuperações médias de 85,1% (AA), 84,2% (HMF) e 92,9% (FF), com RSD <20%,

demonstrando a capacidade de extrair simultaneamente os 3 analitos.

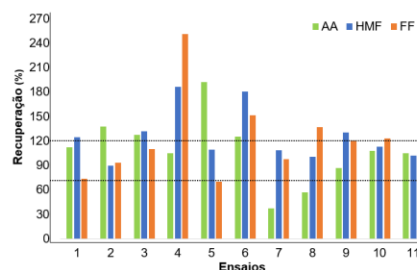


Figura 1. Recuperações de AA, HMF e FF obtidas do DCC 2³.

Conclusões

Foi possível otimizar um procedimento de preparo de amostra mais simples e ambientalmente amigável para extração e determinação simultânea de AA, HMF e FF em alimentos infantis, quando comparado ao procedimento utilizado como referência. As próximas etapas consistem na validação do método e sua aplicabilidade em alimentos infantis da região Sul do estado do Rio Grande do Sul. Estes dados irão auxiliar na implementação de regulamentação e monitoramento destes contaminantes no Brasil visando a promoção de alimentos infantis mais seguros

Agradecimentos

Os autores agradecem aos órgãos de fomento CNPq e FAPERGS pelo apoio financeiro.

Referencias e notas

- (1) Capuano, E.; Flogliano, V. *LWT – Food Sci. Tech*, **2011**, *44*, 793-810.
- (2) Boyaci-Gunduz, C. P. *Curr. Opin. Food. Sci.*, **2022**, *46*, 100849.
- (3) Shi, J.; Shao, Z.; Li, H.; Zhang, Y.; Wang, S., **2019**, *24*, 3734.
- (4) INMETRO, **2020**. DOQ-CGCRE-008.
- (5) European Commission, **2017**. Regulation (EU) 2017/2158.

Determinação da concentração total e da bioacessibilidade de B, Ba e Zn em castanhas e nozes por MIP OES

Catarine Cavada (PG)^{a*}, Caroline D. Clasen (PG)^a, Clarissa M. Moreira dos Santos (PQ)^a, Mariana A. Vieira (PQ)^a

^aUniversidade Federal de Pelotas, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Capão do Leão, RS, Brasil, 96160-000.

*e-mail: cathy cavada@hotmail.com

Palavras Chave: *frutos secos, bioacessibilidade, MIP OES*

Introdução

As castanhas e as nozes são frutos secos consumidos globalmente, devido ao seu alto valor nutricional. São alimentos ricos em minerais essenciais à saúde humana como Ca, Cu, Fe, K, entre outros.¹ Os minerais não podem ser sintetizados pelo organismo, portanto devem ser fornecidos através da alimentação. Entretanto, para que o elemento químico possa exercer sua atividade biológica, deve atingir o alvo celular em concentrações mínimas necessárias.² Além disso, é importante ressaltar que estes alimentos podem conter elementos potencialmente tóxicos como Ba, Pb, Co e outros.¹ Portanto, determinar apenas a concentração total de elementos químicos presentes no alimento não é suficiente para avaliar os riscos e benefícios de sua ingestão. É necessário determinar a fração bioacessível, pois esta fornece informações sobre a quantidade do constituinte que é liberada da matriz alimentar, tornando-o disponível para a absorção pelo organismo humano.³ Assim, o objetivo deste trabalho é avaliar a concentração total e a fração bioacessível de elementos essenciais e potencialmente tóxicos em castanha do Pará, castanha de caju e noz-pecã, empregando a técnica de Espectrometria de Emissão Óptica com Plasma induzido por Micro-Ondas (MIP OES).

Resultados e discussão

Para a determinação da concentração total, as amostras de castanha do Pará, castanha de caju e noz-pecã cruas foram submetidas à decomposição ácida utilizando sistema de refluxo, em condições otimizadas. A exatidão foi avaliada através de ensaios de adição e recuperação, que variaram de 95 a 112%.

Para a determinação da fração bioacessível, foi utilizado o método de digestão in vitro, proposto por Minekus *et al.*⁴ A avaliação da exatidão dos ensaios de bioacessibilidade foi realizada através de um balanço de massas.

As concentrações totais, em mg kg⁻¹, obtidas nas amostras de castanha do Pará, castanha de caju e noz-pecã foram 8,94; 8,93 e 7,08 para o B; 59,86; 79,49 e

32,31 para o Zn, 1014,43; 0,39 e 17,18 para o Ba, respectivamente.

Dos elementos essenciais investigados, o B apresentou os maiores percentuais de fração bioacessível na castanha do Pará e castanha de caju com 17% e 16%, respectivamente, enquanto o Zn apresentou os maiores percentuais de fração bioacessível na castanha de caju e na noz-pecã com 15% e 18%, respectivamente. O Ba, elemento potencialmente tóxico, apresentou fração bioacessível apenas na castanha do Pará com 11%.

Conclusões

Com os resultados obtidos, foi possível observar que os frutos secos analisados, fornecem elementos essenciais para o bom funcionamento do organismo humano, mas é necessário ingerir outros alimentos para atingir as exigências diárias de minerais.

Embora o Ba apresentou uma baixa bioacessibilidade, é importante destacar a necessidade de se avaliar a concentração deste e de outros elementos potencialmente tóxicos, como o Pb, neste tipo de alimento, uma vez que esses analitos podem se tornar um risco à saúde se sua concentração exceder o limite máximo permitido de consumo diário.

Agradecimentos

CAPES; CNPq e INCTAA.

Referências

- (1) Adolfo F. R.; Nascimento P.C.; Brudi L.; Bohrer D. *Food Chem.* **2021**, 345, 128766.
- (2) Xavier, A. D. S.; Furtado, D. Z.S.; Assunção, N. A.; Nascimento, A. N. *J. Food Compos. Anal.* **2019**, 83, 1033259.
- (3) Bonemann, D.H.; Luckow, A. C. B.; Pereira, C. C, *et al. J. Food Compos. Anal.* **2021**, 96, 103716.
- (4) Minekus M, Alminger M, Alvito P, Balance S, *et al. Food & Function*, **2014**, 1113-1124.

Estudo da ocorrência de produtos farmacêuticos e de higiene pessoal em águas da cidade de Rio Grande/RS

Luciana T. Oliveira¹ (IC)*, Sergiane C. Barbosa¹ (PQ), Estefani P. Rosa¹ (IC), Sthepanie L. Valle¹ (IC), Jônatas Külzer¹ (IC), Manuel Cezar M. B. N. Souza² (PQ), Veronica S. Borba¹ (PQ), Ednei Gilberto Primel¹ (PQ).
Lucianat007@gmail.com

¹Universidade Federal do Rio Grande - FURG, Escola de Química e Alimentos, Laboratório de Análise de Compostos Orgânicos e Metais - LACOM, Rio Grande, Rio Grande do Sul, Brasil, 96203-900

²Universidade Federal do Rio Grande - FURG, Instituto de Oceanografia, Laboratório de Biotecnologia de Halófitas, Rio Grande, Rio Grande do Sul, Brasil, 96203-900

Palavras Chave: Cromatografia Líquida, Extração em Fase Sólida, Contaminantes Emergentes

Introdução

Os Produtos Farmacêuticos e de Cuidado Pessoal (PPCPs) constituem uma categoria de substâncias intrinsecamente relacionados ao cotidiano da população. Após o uso, muitos PPCPs são excretados na forma de compostos originais ou metabólitos ativos, ingressando nos ecossistemas aquáticos através de diversas vias de contaminação (1). Várias pesquisas têm demonstrado os impactos prejudiciais que os PPCPs podem representar para aos organismos aquáticos. Portanto, a avaliação dos níveis de ocorrência e a análise dos riscos apresentados pelos PPCPs nos ecossistemas aquáticos têm sido uma preocupação (2). Desta forma, este trabalho tem como objetivo avaliar a ocorrência por PPCPs em amostras de águas de superfície na cidade do Rio Grande/RS empregando a Extração em Fase Sólida (SPE) e determinação por Cromatografia Líquida acoplada a Espectrometria de Massas em série (LC-MS/MS).

Resultados e discussão

Foram escolhidos 5 pontos amostrais localizados em diferentes locais urbanos da cidade de Rio Grande (Figura 1). As amostras de água serão coletadas em 4 estações com o objetivo de avaliar a sazonalidade.

Figura 1. Mapa dos pontos amostrais



As amostras são coletadas em frascos âmbar e transportadas até o laboratório onde são determinados os PPCPs (3), e os parâmetros físico-químicos.

As amostras coletadas na estação verão (fev/2023) apresentaram valores de pH entre 7,24 e 8,48. A salinidade variou entre 0,36 e 29,63 psu, e a condutividade entre 711 e 44756 $\mu\text{S}/\text{cm}$. As amostras do ponto 4 e 5 apresentaram maior valor de salinidade e condutividade elétrica. O oxigênio dissolvido, que é um parâmetro importante ao avaliar a qualidade da água, uma vez que é vital para a preservação da vida aquática apresentou valores entre 2,75 e 9,38 mg/L.

Dos 28 PPCPs avaliados, 13 compostos foram detectados em pelo menos uma das amostras (acetaminofeno, benzilparabeno, bisfenol-A, cafeína, carbamazepina, diclofenaco-sódico, furosemida, ibuprofeno, lidocaína, metilparabeno, propilparabeno, sulfametoxazol e trimetoprima).

O ponto 1 (43%) e 2 (36%) apresentaram maior percentual de número de compostos detectados com relação aos outros pontos. E no ponto 5, localizado no saco da Mangueira, foram detectados apenas 3 compostos.

Conclusões

Os resultados apresentam dados inéditos relacionados a presença dos PPCPs em águas na cidade de Rio Grande, possibilitando traçar um panorama e contribuir para a discussão sobre a qualidade das águas.

Agradecimentos

Agradecemos ao Programa Institucional de bolsas de Iniciação Científica PIBIC/CNPq, PROBIC/FAPERGS, EQA – FURG e FINEP/CTInfra.

Referências e notas

- (1) GUO, X. et al. *J. Haz. Mat.* **2023**, 459, 132163
- (2) Li, F. et al. *Mar. Pollut. Bull.* **2020**, 151, 110810.
- (3) Chaves, M. J. et al. *Sci. Total Environ.* **2020**, 139374.

Desenvolvimento de uma Cerveja de Baixo Teor Alcoólico Estilo *International Pale Lager*. Avaliação do Teor Alcoólico e Degustativo Através da Técnica da Língua Eletrônica.

Kleitton Eduardo da Silva (PG), Endler Marcel Borges de Souza (PQ) e Paulo Cesar de Jesus (PQ)*

Universidade Regional de Blumenau- FURB, Blumenau, SC. e-mails: kesilva@furb.br, pcj@furb.br e embsouza@furb.br

Palavras-chave: *cerveja, baixo teor alcoólico, língua eletrônica, cromatografia*

Introdução

O sabor é percebido por qualidades gustativas básicas como acidez, salinidade, doce e amargor. Outros dois tipos são a pungência e adstringência. Uma língua eletrônica imita o sistema gustativo humano onde sensores detectam as espécies químicas presentes nas amostras líquidas (TOKO, 2016). Na indústria cervejeira as aplicações da língua eletrônica incluem: a detecção de fraudes e adulterações; distinção de marcas e ou estilos; discriminação de notas de envelhecimento; detecção de deterioração e off-flavors e; monitoramento do processo de produção (WANG, 2022). Cerveja com baixo teor alcoólico é aquela cujo conteúdo de álcool presente é superior a 0,5% e inferior ou igual a 2,0% em volume (v/v), sendo o principal controle de qualidade e estabilidade para bebidas. Neste trabalho foi realizado o desenvolvimento de uma cerveja com teor alcoólico reduzido, estilo *International Pale Lager*, sendo caracterizada por língua eletrônica e determinado o teor de álcool por destilação e cromatografia gasosa, além da determinação de outros parâmetros analíticos.

Resultados e discussão

Na produção das cervejas de baixo teor alcoólico foram utilizados os maltes Pale Ale e Cara Clair, 100 gramas por litro de cada. Este foram moídos em moedor de rolos com abertura de 1,60 mm entre eles, moagem grossa. A brassagem a frio foi realizada em temperatura ambiente e o período de extração foi de 2 horas. A determinação do álcool foi realizada pelo método EBC Analytica 9.2.1, e a determinação do teor de álcool por cromatografia gasosa com injeção do líquido destilado, método EBC Analytica 9.2.4 modificado. Dois lotes foram produzidos e o teor alcoólico apresentado foi de 1,07% e 1,14%, respectivamente (Tabela 1). A análise com a língua eletrônica foi realizada com as cervejas de baixo teor alcoólico produzidas e para comparação, com o padrão para o estilo *International Pale Lager* foi utilizada Heineken com álcool 5,0% v/v e uma Heineken sem álcool (0,0%). Fora utilizada a língua eletrônica α Astree da AlphaMOS, que possui um conjunto de sete sensores que avaliam os sabores dos líquidos quanto ao doce,

salgado, amargo, azedo, adstringência, pungência e umami.

Tabela 1. Resultados do teor alcoólico da cerveja

Parâmetro ^(a)	Lote 1	Lote 2	Método
Álcool % (m/v)	0,82	0,89	Destilação
Álcool % (v/v)	1,05	1,13	Calculado
Álcool % (m/v)	0,84	0,90	Cromatografia
Álcool % (v/v)	1,07	1,14	Cromatografia

(a)m/v = massa/volume; v/v= volume/volume

As análises estatísticas foram executadas no software do equipamento, tendo como base a técnica de análise paramétrica multivariada dos componentes principais (PCA). Pode-se observar que o lote 1 apresentou o perfil sensorial mais próximo em relação ao padrão, Heineken® com álcool 5,0% v/v, com uma discriminação de 80%, apontando uma boa similaridade entre as amostras testes. As amostras do lote 1 apresentaram também pH 4,5, amargor 22,69 IBU, estabilidade de espuma 230,4 s, valor energético 19,30 kcal/350 mL, parâmetros estes que classificam a cerveja produzida dentro do que se espera, para o estilo *International Pale Lager*.

Conclusões

As amostras de cerveja do lote 1 foram as que possuíram o perfil sensorial mais próximo em relação ao padrão para o estilo. A cerveja padrão sem álcool apresentou menos similaridade do que a com álcool e as demais análises realizadas, classificaram a mesma dentro do estilo desejado, como uma cerveja de baixo teor alcoólico.

Agradecimentos

Ao Senai-Blumenau/SC, PPGQ-FURB, LAC-FURB.

Referencias e notas

- (1) TOKO, K. e TAHARA, Y. Electronic Noses and Tongues in Food Science, Academic Press, **2016**, p. 161-170.
- (2) WANG, A. et. al. Food Science and Technology, Campinas, vol. 42, **2022**, p. 1-8.

Desenvolvimento de um método de preparo de amostras para análise elementar em vinhos por MIP OES

Charlie G. Gomes^{1*} (PG), Daisa H. Bonemann (PG)¹, Jessica da R. Porto (PG)¹, Yasmin R. Bloedorn (PG)¹, Mariana M. da Cunha (IC), Mariana A. Vieira (PQ).

¹ Universidade Federal de Pelotas, Programa de Pós-Graduação em Química, Campus Capão do Leão. Capão do Leão. RS

*charliegomesii@gmail.com

Palavras-Chave: Vinho, Planejamento fatorial, espectrometria atômica, MIP OES

Introdução

O vinho é uma das bebidas mais antigas e apreciadas pela humanidade. Além de sua importância cultural e social, o vinho também desperta grande interesse científico devido à complexidade de seus componentes e às múltiplas variáveis envolvidas em sua produção. A composição química do vinho pode ser variada, constituída principalmente por água, etanol, diversos compostos orgânicos, compostos fenólicos e minerais. Ressalta-se que a composição mineral do vinho pode afetar significativamente a qualidade na produção da bebida. Assim, o objetivo desse trabalho é desenvolver um método de preparo de amostra mais brando, empregando a extração ácida com ultrassom, para determinação multielementar em amostras de vinho pela técnica de MIP OES.

Resultados e discussão

Para os estudos de otimização, uma amostra de vinho tinto seco foi empregada. O método de extração ácida com ultrassom foi otimizado através de um planejamento fatorial completo, com 30 ensaios sendo um 2⁴ com 8 pontos axiais e 6 pontos centrais. A tabela 1 mostra os fatores que foram avaliados como variáveis independentes. Já as respostas avaliadas (variáveis dependentes) foram fatores que qualificam o método de preparo de amostras: sólidos, carbono e acidez residual, sendo feito um cálculo de desejabilidade.

Tabela 1. Variáveis e níveis do planejamento fatorial

Variáveis	Níveis				
	-2	-1	0	1	2
Volume H ₂ O ₂ (mL)	2	3	4	5	6
Volume HNO ₃ (mL)	0	0,25	0,5	0,75	1
Tempo (min)	60	90	120	150	180
Temperatura (°C)	25	38,75	52,5	66,25	80

Como resultado do planejamento, foi obtido o comportamento das variáveis independentes em função da desejabilidade (Figura 1). Através do gráfico de Pareto, observa-se efeitos significativos positivos para

temperatura, volume de H₂O₂ e volume de HNO₃ e efeito linear positivo e negativo respectivamente para temperatura e volume de HNO₃. Assim, a condição ótima obtida foi: 5 mL de H₂O₂; 0,25 mL de HNO₃ à 66 °C por 149 min. Estas condições foram avaliadas através de um teste T entre os valores preditos pelo modelo versus os observados experimentalmente.

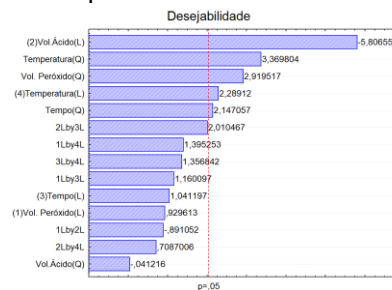


Figura 1. Gráfico de Pareto para as respostas do planejamento.

Para avaliar a exatidão do método desenvolvido, a amostra de vinho foi preparada por dois outros métodos e então determinou-se a concentração dos analitos pela técnica de MIP OES. Os valores obtidos não se diferenciaram estatisticamente e uma boa precisão foi obtida, com RSDs inferiores a 9 %.

Conclusões

O método de preparo de amostra desenvolvido através do planejamento fatorial, mostrou-se eficiente para obter a melhor condição empregando o banho ultrassônico. Além disso, permitiu a análise multielementar em vinhos (18 analitos), o que não havia sido relatado em nenhum trabalho utilizando esse sistema e planejamento fatorial.

Agradecimentos

CAPES, CNPq

Referencias e notas

- (1) RANAWEERA, R. K., et al. *Molecules*, 26(14), 2021.
- (2) NOVAES, C. G.; et al. *Microchemical Journal*, 2016, v. 128, p. 331-346,
- (3) LIAO, X., et al. 2020, 1071-1079. 2020.

Técnicas voltamétricas para identificação e caracterização de grupos glicóis por meio do eletrodo Cu/CuO

Emily Clara Aguiar Welter (IC)^{1*}, Giovana Gomes Porn (IC)¹, Cleber Antonio Lindino (PQ)¹. mlyclaras2@gmail.com

¹ GIPEFEA, Universidade Estadual do Oeste do Paraná, Rua da Faculdade, 645, CEP 85900-000, Toledo/PR

Palavras Chave: Eletroquímica, Glicerol, Etilenoglicol, alimentos

Introdução

Substâncias como o glicerol e propilenoglicol são utilizadas em muitos setores industriais, incluindo o setor alimentício. Já substâncias como o etilenoglicol, possuem um alto nível de toxicidade, podendo ser letal se ingerido.¹ Devido à grande semelhança física entre as substâncias, contaminações podem não ser facilmente identificadas. Este trabalho utilizou a voltametria cíclica e de pulso diferencial para realizar a identificação e caracterização dos grupos glicóis dessas três substâncias.

Resultados e discussão

Foram preparados 250 mL de soluções de glicerol, propilenoglicol e etilenoglicol, cada uma delas na concentração de 0,7 g L⁻¹ e utilizou-se como eletrólito uma solução de NaOH 1,0 mol L⁻¹. Os perfis eletroquímicos das amostras foram obtidos por voltametria cíclica (VC) em três ciclos e voltametria de pulso diferencial (VPD). A faixa de potencial utilizada para ambas foi de -0,9 a +0,7 V e a velocidade de varredura de 50 mV s⁻¹, em potenciostato Metrohm Autolab Pgstat 101, com eletrodo de trabalho de Cu/CuO, eletrodo de referência Ag/AgCl e contra eletrodo de aço inoxidável. Tanto a VC quanto a VPD apresentam picos que representam sobreposições de diferentes grupos oxidáveis presentes em cada uma das amostras. As características dos picos de cada amostra, bem como suas diferenças de potencial e corrente podem ser utilizados para analisar as diferenças eletroquímicas de cada substância, relacionando-as com sua estrutura química a fim de identifica-las. A Figura 1 apresenta a VC das amostras de glicerol, propilenoglicol e etilenoglicol e a Figura 2 apresenta a VPD das mesmas, mostrando que o eletrodo de Cu/CuO foi eficiente em destacar perfis diferentes de cada uma.

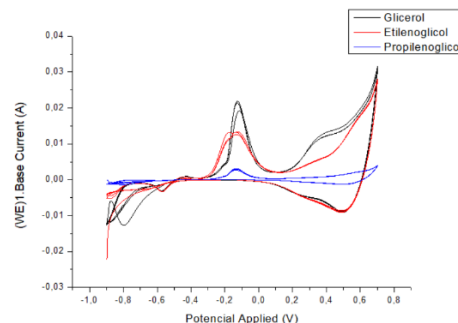


Figura 1. VC para amostras de glicerol, propilenoglicol e etilenoglicol (0,7 g L⁻¹) em NaOH 1,0 mol L⁻¹. Temp. de 25,0 °C

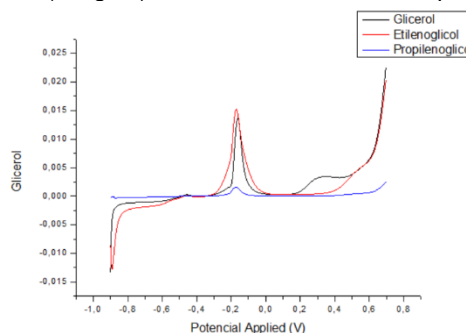


Figura 2. VPD para amostras de glicerol, propilenoglicol e etilenoglicol (0,7 g L⁻¹) em NaOH 1,0 mol L⁻¹. Temp. de 25,0 °C

Conclusões

A VC e VPD foram eficientes para traçar os perfis eletroquímicos das amostras e têm potencial para identifica-los.

Agradecimentos

Ao PET Química, ao FNDE e à unioeste.

Referências e notas

- (1) CETESB. Etilenoglicol. FIT - Ficha de informação Toxicológica, São Paulo, SP, Jul. de 2020.

O uso da espectroscopia na região do UV-vis para a obtenção do perfil espectral comparativo de uísques originais e falsificados

Victoria Borges Vaz de Leon¹ (IC)*, Bruna Orlando Corrêa¹ (IC), Bruna Pereira de Lima¹ (IC), Taís Poletti¹ (PG), Diogo La Rosa Novo¹ (PQ), Carla de Andrade Hartwig¹ (PQ).

¹Universidade Federal de Pelotas (UFPEL), Pelotas-RS; *victoriab.leon@yahoo.com.br

Palavras Chave: Falsificação, Uísque, UV-Vis.

Introdução

A falsificação de bebidas é uma prática antiga devido ao seu alto valor agregado. Uma das bebidas mais falsificadas é o uísque, o qual tem sido alvo de diferentes falsificações, como a adição de substâncias corantes à bebidas de menor valor, a diluição do uísque em água, ou até mesmo a combinação com outra bebida alcoólica de qualidade inferior. A adulteração de bebidas traz diversos problemas para a saúde, economia e sociedade, tendo em vista que não há um controle de qualidade das matérias-primas e do seu processo de fabricação, o que pode causar sérios danos à saúde, e, por isso, a falsificação de bebidas é proibida por lei. Nesse sentido, o objetivo deste trabalho foi investigar de modo comparativo o perfil espectral de amostras de uísque original e intencionalmente falsificado, utilizando a Espectroscopia na região do Ultravioleta Visível (UV-Vis), sendo uma análise rápida e de baixo custo quando comparada a outras técnicas analíticas.

Resultados e discussão

Foram analisadas 8 amostras (sendo 7 falsificações intencionais): A - uísque original; B - uísque com cachaça (1:1) e tintura de iodo; C - uísque com álcool 70% (1:1) e tintura de iodo; D - uísque com álcool 96% (1:1) e tintura de iodo; E - álcool 70% e tintura de iodo; F - água destilada e tintura de iodo; G - cachaça e tintura de iodo; e H - uísque com água destilada (1:1) e tintura de iodo. O teor alcoólico das bebidas utilizadas foi de 38%v/v para uísque e 32%v/v para cachaça. Para leitura por espectroscopia na região do UV-Vis (250 à 410 nm), as amostras foram diluídas (1:4) em água destilada.

Como pode-se observar na **Figura 1**, a amostra de uísque original apresenta pico máximo de absorção em torno de 285 nm, e valores de absorção superiores às falsificações preparadas com uísque em sua composição, em todos os comprimentos de onda avaliados. As falsificações preparadas sem uísque na composição, no entanto, apresentaram perfis espectrais semelhantes entre si, porém significativamente diferentes das demais falsificações, principalmente pela

absorbância evidenciada em torno de 360 nm. Destas, a amostra sem álcool na composição (F) apresentou menores valores de absorção, evidenciando a influência do teor alcoólico no perfil espectral observado. Ainda, evidencia-se a necessidade da realização de análises em maiores fatores de diluição, com vistas à obtenção de perfis espectrais mais satisfatórios.

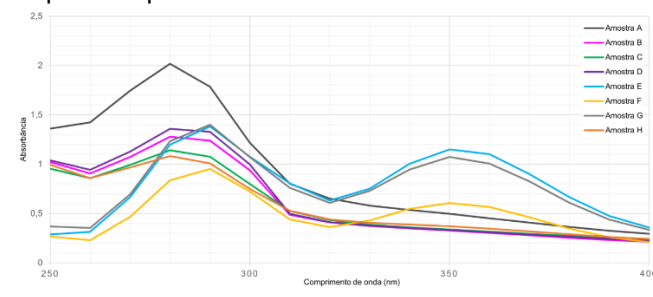


Figura 1. Perfis espectrais de uísque original ou falsificações intencionais, obtidos por espectroscopia na região do UV-Vis.

Conclusões

Foi possível a obtenção e análise comparativa dos perfis espectrais de amostras de uísque original e falsificações intencionais. A espectroscopia na região do UV-Vis mostrou-se uma ferramenta com potencial na investigação de falsificação de bebidas, além de ser uma técnica rápida e de baixo custo.

Agradecimentos

À UFPEL, à organização da SBQSul 2023, aos órgãos de fomento CAPES, CNPq e FAPERGS.

Referências e notas

- (1) MACKENZIE, W. M.; AYLOTT, R. I. Analytical strategies to confirm Scotch whisky authenticity. *The Analyst*, p. 607-612, **2004**.
- (2) MARTINS, A.R.; TALHAVINI, M.; VIEIRA, M.L.; ZACCA, J.J.; BRAGA, J.W.B. Discrimination of whisky brands and counterfeit identification by UV-Vis spectroscopy and multivariate data analysis, *Food Chemistry*, p. 142-151, **2017**.

Caracterização de méis de *Apis mellífera* por meio de análise de componentes principais

Vitor G. Foltz (IC)^{1*}, Mariana A. Xavier (IC)¹, Victor L. R. Pinheiro (PG)¹, Juliana Ferreira (PG)², Marcela Boroski (PQ)², Cleber A. Lindino (PQ)¹ vitorfoltzgarcia@gmail.com

¹ GIPEFEA, Universidade Estadual do Oeste do Paraná, Rua da Faculdade, 645, CEP 85900-000, Toledo/PR

² LEIMAA, UNILA, Av. Tarquínio Joslin dos Santos, 1000, CEP 85870-650, Foz do Iguaçu/PR

Palavras-chave: adulteração, quimiometria, alimentos.

Introdução

A produção de mel de *Apis mellífera* no Brasil em 2021 foi de 55.828 toneladas e o Paraná é o segundo maior produtor, com 15% do total, sendo uma atividade econômica importante, normalmente agregada a cooperativas e associações.¹ Garantir a integridade e a autenticidade do mel exige estratégias de boas práticas no processo produtivo e de técnicas de análise para detectar alterações não desejadas ou adulterações nos mesmos. A Quimiometria associada à técnicas voltamétricas é ferramenta importante neste processo.

Resultados e discussão

As amostras de méis foram obtidas de produtores locais do Oeste do Paraná e caracterizadas por parâmetros como pH, acidez livre, flavonoides, umidade e DPPH. Em seguida, as amostras foram diluídas em solução de NaOH 0,1 mol L⁻¹. Os perfis eletroquímicos das amostras foram obtidos por voltametria cíclica (VC) nas velocidades de 20 mV e 200mV, na faixa de 0,0 a 1,0 V, em potenciostato Metrohm Autolab Pgstat 101, com eletrodo de trabalho de Cu/CuO, referência Ag/AgCl/KCl 3 mol L⁻¹ e contra eletrodo de aço inoxidável. A espectrofotometria UV-visível foi realizada em espectrofotômetro Shimadzu 1800 PC com o uso de cubetas de quartzo de caminho ótico de 1,0 cm e varredura nos comprimentos de onda de 200 a 1100 nm. O perfil voltamétrico apresenta processo anódico irreversível devido à oxidação dos açúcares redutores (principalmente glicose e frutose) presentes nas amostras de mel. O mecanismo da reação envolve interação das hidroxilas presentes na solução com a camada de CuO. As características semicondutoras do CuO causam a formação de “electron holes”, h⁺, e a formação de espécies reativas. Estas espécies reagem com os carboidratos formando produtos na interface do eletrodo na presença de hidroxilas e “electron holes”². A Análise de Componentes Principais (PCA) foi obtida por meio dos valores de potencial em 0,85 e 0,20 V para a velocidade de varredura de 200 mV, e 0,68 e 0,20 V,

para a velocidade de varredura de 20 mV, e absorvâncias em 400 e 300 nm, além dos valores obtidos na caracterização do mel. A Figura 1 apresenta o resultado do PCA para as amostras de méis de diferentes localidades, em diferentes épocas de coleta. O PCA pode diferenciar entre diferentes períodos de coleta (verão, outono e inverno) e, provavelmente, esta diferença está associada à oferta de pólen de diferentes espécies florais ou alimentação artificial.

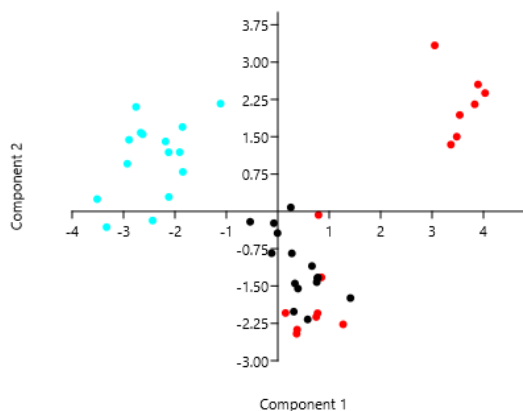


Figura 1. Gráfico de Scores de PCA para as amostras de méis. ● coleta 1; ● coleta 2; ● coleta 3.

Conclusões

O método de PCA permitiu diferenciar amostras de méis de *Apis mellífera* com épocas de coletas diferentes.

Agradecimentos

Ao PETq e a UNIOESTE pelo apoio e oportunidade.

Referências e notas

- (1) Brasil. IBGE. Produção de mel. Pesquisa Pecuária Municipal. 2022
- (2) Barragan et al. Analytical Chemistry, 90, 3357-3365, 2018.

Determinação de Oxalato em Amostras de Arroz Polido e Integral Comerciais de Cultivo Convencional e Orgânico

Letícia C. Rios^{1*} (IC), Krystopher B. Krammer¹ (IC), Juliana M. Dias¹ (PG), João B. S. Espinelli Junior² (PQ), Sergiane C. Barbosa³ (TC), Ednei G. Primel³ (PQ), Rodolfo Carapelli¹ (PQ)

1. Laboratório de Eletro Espectro Analítica, Escola de Química e Alimentos, Universidade Federal do Rio Grande, Av. Itália, km 8, Bairro Carreiros, Rio Grande, RS, Brasil.

2. Campus Feliz, Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande Sul, Rua Princesa Isabel, 60, Bairro Vila Rica, Feliz, RS, Brasil

3. Laboratório de Análise de Compostos Orgânicos e Metais, Escola de Química e Alimentos, Universidade Federal do Rio Grande, Av. Itália, km 8, Bairro Carreiros, Rio Grande, RS, Brasil.

Palavras Chave: Processamento do arroz, Cultivo orgânico de alimentos, Antinutrientes em alimentos, Permanganometria

Introdução

Os alimentos desempenham um papel fundamental no sustento do organismo humano, uma vez que são portadores dos nutrientes essenciais necessários para a manutenção das funções fisiológicas. Contudo, é importante ressaltar que na composição dos alimentos fatores antinutricionais também podem estar incluídos, destacando-se os derivados do metabolismo secundário das plantas [1].

O oxalato, presente em cereais, vegetais e alimentos industrializados, principalmente de origem vegetal, tem a capacidade de se ligar ao cálcio, formando cálculos renais devido à baixa solubilidade na urina. Encontrado em vegetais como oxalato de sódio e potássio solúveis, bem como sais insolúveis de cálcio e magnésio, sendo que, os oxalatos solúveis têm maior biodisponibilidade [2]. O Objetivo desse trabalho foi avaliar como o cultivo, orgânico e convencional influencia na síntese de oxalatos em amostras de arroz comercial polido e integral.

Resultados e discussão

Nesse trabalho foram analisadas 22 amostras, sendo 9 amostras comerciais de arroz integral (4 convencionais e 5 orgânicas) e 13 amostras comerciais de arroz polido (6 de arroz convencional e 7 de arroz orgânico).

O oxalato foi determinado através de titulação permanganométrica nas amostras de arroz após extração com ácido sulfúrico. Após a determinação foi constatado valores médios de concentração de oxalato de $51,6 \pm 6,9$ e $52,8 \pm 3,7$ mg kg⁻¹ respectivamente para os grupos de amostras de arroz integral de cultivo convencional e orgânico. Os valores de oxalato encontrados nas amostras de arroz polido foram respectivamente de $30,0 \pm 4,3$ e $26,3 \pm 7,8$ mg kg⁻¹ para convencionais e orgânicas. A diferença de

concentração observada no processamento deve-se provavelmente ao polimento do grão de arroz, que afeta a concentração de nutrientes e antinutrientes que são removidos durante o processo. Para os sistemas de cultivo a não observância de diferença sugere que as condições ambientais as quais o grão é exposto durante o cultivo e armazenamento não surtem influência na produção de sais de oxalato.

Métodos de cozimento reduzem o teor de oxalato e pode ser uma estratégia para diminuir a oxalúria, porém o valor obtido no arroz cru já não apresenta riscos significativos a saúde. Posteriormente, essa metodologia será aplicada em amostras cozidas.

Conclusões

Analisando os resultados encontrados nesse trabalho é possível observar que a adoção de práticas orgânicas ou convencionais não influenciam na síntese de sais de oxalato em amostras de arroz. Além disso, que o processamento do arroz leva a uma redução de aproximadamente de 50% no teor oxalato.

Agradecimentos

LEEA, LACOM, PPGQTA, EQA, FURG, IFRS.

Referencias e notas

- (1) Pinheiro, L. S.; Massoli, J. K. P.; Neres, L. L. F. G.; da Silva, H. S. *Research, Society and Development*, **2021**, v. 10, e273101522622.
- (2) Benevides, C. M. J.; Souza, M. V.; Souza, R. D. B.; Lopes, M. V. *Segurança Alimentar e Nutricional*, **2011**, 18(2), 67-79.

Resíduo de cromo corporal e em diferentes partes do pacu (*Piaractus mesopotamicus*) após um ensaio de digestibilidade

Rafaela Mochinski Gonçalves¹ (PG); Patricia da Silva Dias² (PG); Jailson Novodworski³ (PG); Emerson José Alves Matos³ (PG); Leda Maria Saragiotto Colpini⁴ (PQ); Fábio Meurer^{1*}(PQ).

¹Programa de Pós-Graduação em Zoologia, Universidade Federal do Paraná;

²Programa de Pós-Graduação em Biologia Animal, Universidade Estadual de Campinas;

³Programa de Pós-Graduação em Zootecnia, Universidade Federal do Paraná

⁴Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia Ambiental, Universidade Federal do Paraná

*E-mail: fabio_meurer@yahoo.com.br

Palavras Chave: Aquicultura, Composição Química, Metal Pesado, Peixe Nativo.

Introdução

O Pacu é um peixe nativo importante na aquicultura do Brasil, trabalhos de digestibilidade dos nutrientes e energia de ingredientes/dietas em peixes são bastante importantes para a nutrição adequada destes animais. Em função da dificuldade da determinação deste parâmetro no ambiente aquático, há a necessidade da utilização de marcadores nas dietas. O óxido crômico é usado como marcador em dietas para tais estudos com peixes de interesse comercial (1). Apesar de ser considerado inerte e não absorvível (2) o seu fornecimento constante durante o período experimental levanta o questionamento da possibilidade da absorção de alguma quantidade deste e na distribuição do mesmo do corpo do peixe. O presente trabalho teve como objetivo a avaliação do cromo residual em pacus e a distribuição deste em algumas partes do seu corpo depois de submetidos a um período experimental de digestibilidade, consumindo dietas contendo 0,1% de óxido crômico.

Resultados e discussão

Após 104 dias de experimento consumindo dietas contendo 0,1% de óxido crômico, os peixes passaram por 40 dias sendo alimentados com dietas isentas de óxido crômico, dois peixes foram abatidos para as análises da concentração de cromo no corpo inteiro, na cabeça, na espinha, no filé, no fígado e no trato digestório, valores que estão apresentados na tabela 1. A análise de cromo foi feita por meio de espectrofotometria de absorção atômica (3). Quando comparado ao corpo inteiro, a concentração de cromo é menor na cabeça e maior na espinha e no trato digestório, nas demais partes corporais a concentração é um pouco mais alta que o apresentado no corpo inteiro, de qualquer forma os valores são inferiores aos valores máximos estabelecidos pela ANVISA de 0,1 mg/kg de cromo.

Tabela 1. Concentração de cromo residual corporal do pacu (*Piaractus mesopotamicus*) e em diferentes partes do seu corpo, após serem submetidos a dietas com a presença do marcador inerte óxido crômico em ensaios de digestibilidade.

Amostra	Concentração de cromo (mg/kg)
Peixe inteiro	0,04
Cabeça	0,02
Espinha	0,06
Filé	0,05
Fígado	0,05
Trato digestório	0,06

Conclusões

O cromo residual em pacus submetidos a experimentos de digestibilidade após poucos dias do fim do consumo de rações com óxido crômico apresenta diferença de concentração entre as partes do corpo.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001 e ao CNPQ.

Referencias e notas

- (1) Sakita, G. Z.; Meira, D. C.; Bremer Neto, H.; Cyrino, J. E. P.; Abdalla, A. L. Chromium oxide used as biological marker was not absorbed by fish. *Arq. Bras. Med. Vet. Zoot.* **2015**, *67*, 755.
- (2) Sayde Hassani, H.; Sajjadi, M.; Falahatkar, B.; Yousefi, A. Determination of apparent digestibility of the common ingredients used in the feed of juvenile *Huso huso*. *Iran. J. Fish. Sci.* **2020**, *29*, 153.
- (3) Kimura, F. T.; Miller, V. L. Improved determination of chromic oxide in cal feed and feces. *J. Agric. Food. Chem.*, 1957, *5*, 216.

Análises exploratórias da metabolômica e da comunidade microbiana do nattô utilizando espectrometria de massas

Britney S. Toyama^{1*} (PG), Alef dos Santos² (PG), Felipe de O. Souza¹ (PG), Vitor H. G. Murakami¹ (IC), Eduardo J. Pilau¹ (PQ). toyamabritney@gmail.com

¹Laboratório de Biomoléculas e Espectrometria de Massas (LaBioMass), Departamento de Química, Universidade Estadual de Maringá (UEM), Maringá, PR, ²Laboratório de Bioquímica Micromolecular de Microorganismos (LaBioMMI), Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos (UFSCar), São Carlos, SP.

Palavras Chave: Nattô, Espectrometria de Massas, *Bacillus subtilis*, Análises metabolômicas, Molecular Networking.

Introdução

Nattô é um alimento tradicional japonês feito a partir de fermentação da soja por bactérias e tem uma textura pegajosa e um sabor forte, cuja produção é feita majoritariamente de forma caseira. É rico em proteínas, vitaminas, probióticos e outros nutrientes que o fazem ser considerado um super alimento ⁽¹⁾. Explorar a fermentação do nattô é essencial para entendermos seus benefícios para a saúde, além do que é gerado e modificado pela ação das bactérias durante o processo. A ferramenta de *Molecular Networking* baseada em espectrometria de massas permite aos usuários avaliar visual e estruturalmente os metabólitos relacionados com padrões de fragmentação semelhantes, proporcionando a possibilidade de interpretar grandes conjuntos de dados de metabolômica e prospectar metabólitos.

Resultados e discussão

Foram realizadas análises metabolômicas e estudos da comunidade microbiana do nattô, realizadas por UHPLC-MSMS e MALDI-TOF-MS, respectivamente. A investigação do metaboloma do nattô resultou em 530 elementos moleculares observados. A correspondência positiva com o banco de dados GNPS e a identificação manual com base em bibliotecas públicas forneceram a identificação putativa de 9 moléculas. Dentre os agrupamentos obtidos no *Molecular Networking*, o grupamento de surfactina foi explorado manualmente e novos compostos foram identificados putativamente.

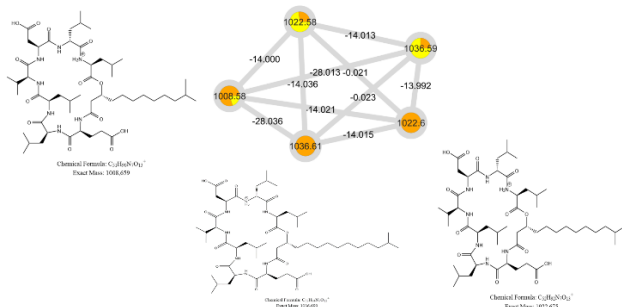


Figura 1. Grupamento da surfactina gerado no *Molecular Networking*

Com o intuito de estudar a comunidade microbiana responsável pela fermentação da soja, foram realizadas a cultura e isolamento da mesma na qual, ao analisa-las por MALDI-TOF-MS, foi possível obter scores positivos para a presença de bactérias da espécie *subtilis*.

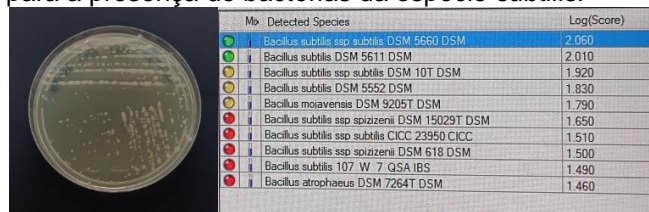


Figura 2. Cultura da comunidade bacteriana presente no nattô e score positivo para *Bacillus subtilis*

Conclusões

A presença de surfactina nos extratos de nattô sugere que a fermentação ocorre por bactérias da espécie *subtilis*, uma vez que a surfactina é produzida exclusivamente pelos *Bacillus subtilis*. Além disso, com as análises da comunidade microbiana utilizando MALDI-TOF-MS, foi possível observar que os isolados microbianos apresentaram scores positivos para bactérias do gênero *Bacillus* da espécie *subtilis*, viabilizando, ainda mais, as hipóteses. O uso dessas abordagens para o estudo do nattô apresentaram um potencial positivo na exploração e compreensão de um reservatório de novos compostos presentes no alimento fermentado.

Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer a UEM, a FINEP, a CAPES, ao CNPq e à Fundação Araucária de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico do Estado do Paraná.

Referencias e notas

- (1) Afzaal, M., et. al., "Nutritional Health Perspective of Natto: A Critical Review", *Biochemistry Research International*, **2022**, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.1155/2022/5863887>>. Acesso em 30 de julho de 2023.

Determinação de ácidos graxos em esgoto bruto doméstico

Fernanda Vasconcelos Telechi¹ (PG)*, Ana Paula Stefanelo e Silva¹ (PG), Gabriele Duarte Ferreira¹ (PG), Jessica Etcheverria do Prado Hartwing¹ (PG), Pedro José Sanches Filho¹ (PQ)

¹ Instituto Federal Sul Rio-grandense -Pelotas/RS. *fernandatelechi@gmail.com

Palavras Chave: (Ácidos gordos, Efluente, Cromatografia, GC/MS).

Introdução

O Brasil encontra-se entre os principais produtores e consequentemente consumidores de óleos vegetais, com uma produção superior a 3 bilhões de litros ao ano. A presença de óleos residuais e de rejeitos graxos no esgoto doméstico tem sido uns dos principais problemas na gestão de resíduos. A determinação e caracterização representa alta relevância para avaliação da efetividade do tratamento de esgoto e na remoção destes, uma vez que isto implica em custos superiores no tratamento de esgotos e maiores impactos ambientais sobre o sistema hídrico¹. O objetivo deste trabalho foi caracterizar os AGs presentes no esgoto bruto através da extração em fase sólida (SPE/C18), seguido de derivatização e determinação por cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas (GC/MS). Para desenvolvimento desse estudo, 100,0 ml de esgoto doméstico bruto, coletado na entrada da estação de tratamento na cidade de Pelotas-RS/Brasil. Foram adicionados com 10% de NaCl e extraídos por C18 eluidos com diclorometano (DCM), os extratos secos em sulfato de sódio anidro foram derivatizado com MSTFA (N-metil-N-(trimetilsilil)trifluoroacetamida) e analisado em modo Splitless no GC/MS².

Resultados e discussão

Para identificação dos picos dos principais AGs foi utilizado o modo MIC usando-se os íons de referência 117; 129 e 132. Para a identificação dos ácidos após a integração pelo TIC foi realizada por comparação com a biblioteca Nist do equipamento, considerando similaridades superiores a 80%, confirmada através do índice de retenção de Van Den Dool e Kratz e através da relação entre o número de carbonos e log do tempo de retenção. Para a quantificação dos compostos foi utilizada uma curva de calibração em ácido oleico entre e 10mg/L e 200mg/L. Entre os AGs destacam-se com 32,3% o Ácido Hexadecanoico, 25,3% Ácido Octadecanoico e 10% Ácido Azeloico os quais são os principais constituintes de óleos vegetais e gorduras animais.

Tabela 1 Principais AGs identificados identificados.

Ácidos	TR (min)	Área relativa	IRcal.	IR NIST
Butanedioic	7.897	3	1320	1322
Hexanedioic	11.084	2,5	1533	1514
Octanedioic	14.024	2,4	1709	1702
Azelaic	15.418	10	1803	1800
Hexadecanoic	18.614	32,3	2054	2015
Heptadecanoic	19.808	3,1	2143	2137
cis-9-Hexadecenoic	20.668	8,3	2223	2215
trans-9-Octadecenoic	20.743	3,9	2229	2227
Octadecanoic	20.943	25,3	2247	2250
Tetracosanoic	26.924	2,2	2842	2827

TR: tempo de retenção (min); IRcal: índice retenção calculado; IR NIST: índice pela biblioteca padrão NIST.

Conclusões

Foi possível caracterizar os principais AGs presentes no esgoto bruto. O percentual de AGs em relação a amostra total foi de 40% que correspondem a 8.8mg em ácido oleico por litro de esgoto. Considerando que a estação processa até 7.500m³/dia isto representa em torno de 66.5kg/dia de AGs. Os dados podem servir de base para o tratamento deste esgoto. bem como um alerta à população sobre as formas corretas de descarte, evitando assim a sobrecarga das estações de tratamento de esgoto e menores prejuízos ao meio ambiente.

Agradecimentos

IFSUL Campo Pelotas/RS; FAPERGS; MECA; GPCA

Referencias e notas

- (1) Lago, S.M.S. Logística reversa, legislação e sustentabilidade: um modelo de coleta de óleo de fritura residual como matéria-prima para produção de biodiesel. 2013. 241F. 2013. Tese de doutorado. UNIOESTE, Toledo, Paraná.
- (2) FERREIRA, F S., & SANCHES FILHO, P. J. (2020). Otimização e validação de metodologia para determinação de hormônios sexuais em matrizes aquosas por SPE e GC/MS: determinação de hormônios sexuais em matrizes aquosas. Revista Ibero-Americana de Ciências Ambientais, v.11 n.5, 2020, p.500-509. doi.org/10.6008/CBPC2179-6858.2020.005.0045.

Contaminação por agrotóxicos no Bioma Pampa: desenvolvimento, validação e aplicação de método de análise em amostras de água da região

Magali Kemmerich¹ (PQ)*, Carlos Borges Filho¹ (TC), Gabriele do Carmo² (TC)

*magalikiemmerich@unipampa.edu.br

1 Universidade Federal do Pampa, campus de Itaqui, Av. Luiz Joaquim de Sá Brito, Itaqui, RS, 97650-000.

2 Universidade Federal do Pampa, campus de Caçapava do Sul, Av. Pedro Anunciação, Caçapava do Sul, RS, 96570-000.

Palavras-Chave: recursos hídricos, extração em fase sólida, cromatografia líquida, detector de arranjo de diodos, preparo de amostra.

Introdução

O avanço da fronteira agrícola na metade Sul do RS alterou o perfil das áreas tradicionalmente utilizadas na produção pecuária e para produção de arroz. Hoje a cultura do arroz está em fase de transição, passando para um sistema misto com as culturas de milho, sorgo, trigo e, principalmente, soja.¹ Apesar da intensa atividade agrícola na região, não há estudos investigando a presença de agrotóxicos nos cursos d'água desta área, principalmente devido à complexidade e alto custo das análises químicas. Assim, este trabalho teve como objetivos I) estabelecer os melhores parâmetros para a quantificação multirresíduo de agrotóxicos empregando SPE e HPLC-DAD, e II) aplicar o método de análise em 25 amostras de recursos hídricos da região do Bioma Pampa.

Resultados e discussão

O método foi desenvolvido para análise de 4 agrotóxicos com ampla utilização nas culturas de arroz e soja (atrazina, azoxistrobina, clomazone, imidacloprido). Os parâmetros utilizados no HPLC-DAD (Thermo Scientific Dionex UltiMate Série 3000) foram: coluna Zorbax eclipse XDB-C18 4,6 x 150 mm 5 µm, forno a 35 °C, fase móvel em gradiente de água ultrapura e acetonitrila, vazão de 0,5 mL/min, tempo de corrida de 30 min. Para otimização do preparo de amostra por SPE foi utilizado planejamento estrela, variando as condições do eluente. O método otimizado consiste em: lavagem do cartucho (Bond elut-C18, 50 mg) com 3 mL de metanol e 3 mL de água ultrapura; pré-concentração de 50 mL de amostra; eluição com 3 mL de metanol 0,3 % de ácido acético (v/v). Na etapa de validação, todos os compostos apresentaram faixa linear ($r^2 > 0,90$) entre 0,00625 e 0,156 mg/L. O limite de quantificação (LQ) foi de 0,00625 mg/L e o limite de detecção (LD) 0,0018 mg/L. Exatidão e precisão foram adequadas, com recuperação entre 70 e 120% e RSD $\leq 20\%$ para todos os níveis avaliados. Em dez/22, foram coletadas 25 amostras de

água (poço e rio) em diferentes cidades do Pampa Gaúcho (Figura 1). As amostras foram analisadas com o método validado e 2 delas (códigos 16 e 17) apresentaram resíduos de clomazone, nas concentrações de < LOQ e 0,0078 mg/L.

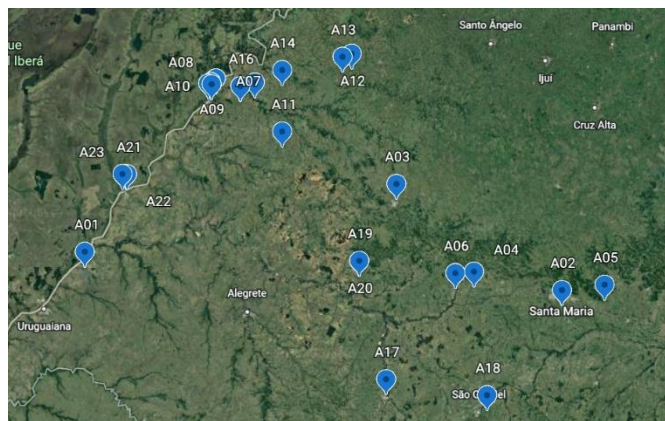


Figura 1. Locais de coleta das amostras.

Conclusões

O método desenvolvido possibilita a análise de resíduos de agrotóxicos empregando um preparo de amostra simples e rápido, além de uma técnica cromatográfica de mais fácil acesso. A análise positiva em 2 amostras demonstra a necessidade de métodos eficazes no monitoramento de sistemas aquáticos do Pampa.

Agradecimentos

À FAPERGS pelo apoio financeiro, além da parceria do LARP-UFSM e da UFSCPA.

Referencias e notas

(1) Kuplich, T. M.; Capoane, V.; Costa, L. F. F. Boletim Geográfico do Rio Grande do Sul, **2018**, 31, 83.

ANA 023

Desenvolvimento de dispositivo ARDUINO/RGB de baixo custo para análise de íons cobre em água

Luan Diego Ramalho Arantes¹ (IC), Mayara Aparecida Oribka¹ (IC), Vitor Teles Correia (PQ)², Marcos Eduardo Treter¹ (PQ), Tiago Andrade Chimenez^{1*} (FM).¹Instituto Federal Catarinense, Campus São Bento do Sul, Santa Catarina, Brasil; ²Instituto Federal de Santa Catarina, Campus Jaraguá do Sul, Brasil.

Palavras Chave: arduino, copper ions, safranin O, RGB sensor, absorption.

Introdução

Segundo a Organização Mundial da Saúde (OMS), o acúmulo de cobre superior a 12 mg por dia pode causar efeitos nocivos, como náuseas, diarreia e até mesmo induzir cirrose hepática, insuficiência renal aguda e morte¹.

Diferentes estudos vêm sendo publicados demonstrando a possibilidade da aplicação de espectroscopia molecular de infravermelho, absorção e fluorescência UV-Vis² para determinar uma ampla gama de íons metálicos. Estas metodologias não são adequadas para realizar análises de rotina fora do laboratório. Portanto, se torna necessário o desenvolvimento de sistemas de detecção de íons metálicos adaptáveis a medições in-situ para água potável doméstica ou para irrigação agrícola.

O objetivo do nosso trabalho é o desenvolvimento de um dispositivo capaz de realizar análises rotineiras de íons de cobre em meio aquoso através da construção de uma plataforma de absorção molecular de baixo custo que é baseada em uma placa *Arduino* acoplada a *LEDs* e sensores de luz do tipo *RGB*.

Resultados e discussão

A plataforma *Arduino/RGB* foi desenvolvida possui local para encaixe da cubeta, permitindo que toda a luz do *LED* passe pela solução, antes da detecção pelo sensor *RGB*. A Figura 1 mostra a imagem real do sistema do dispositivo.

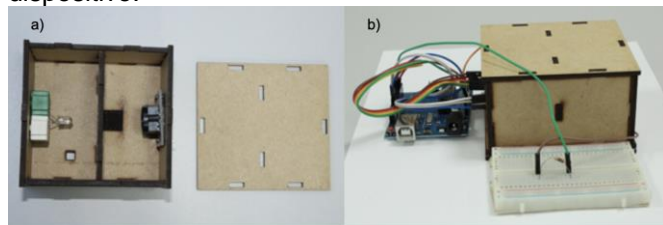


Figura 1. caixa de MDF contendo o sensor *RGB*, *LED* branco conectado ao *Arduino* e a *protoboard*.

De acordo com a equação de Lambert-Beer, a intensidade do sinal de luz absorvido em uma faixa específica de comprimento de onda por um cromóforo é diretamente proporcional à sua concentração³.

A partir de análises obtidas via espectrofotômetro UV/Vis, íons cobre absorvem em torno da faixa de 810 nm. Portanto, assume-se que a concentração deve ser proporcional à luz absorvida no canal de cor vermelha do sensor *RGB*. Conforme mostrado na Figura 2, quanto maior a concentração de íons cobre, maior o resultado da absorbância na cor vermelha do dispositivo *RGB/Arduino*.

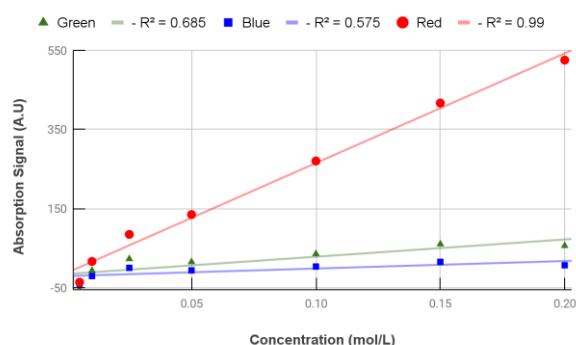


Figura 2. Sinal de luz de absorção vs variação de concentração de íons de cobre.

Conclusões

Os resultados experimentais do dispositivo *RGB/Arduino* mostram que é possível determinar a concentração de íons de cobre de forma tão confiável quanto usando um espectrofotômetro.

Agradecimentos

Este estudo foi financiado pelo Instituto Federal Catarinense (IFC), edital 07/2021.

Referências e notas

- (1) Hung SC, Lu CC, Wu YT. *Sensors*. **2021**;21(4):1099.
- (2) Tang L, Cai M, Huang Z, Zhong K, Hou S, Bian Y, et al. *Sens Actuators B Chem*. **2013**;185:188–94.
- (3) Swinehart DF. The beer-lambert law. *J Chem Educ*. **1962**; 39(7):333.

EFEITO DO pH NA SORÇÃO DE RODAMINA B EM BIOCARVÃO DE CASCA DE ARROZ

Sedami Tozoun Romain Agassin^{1*} (PG), Mirlene Pereira Vitorino¹ (PG), Alexandre Tadeu Paulino^{1,2*} (PQ)

¹Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville, SC, Brasil

²Departamento de Química, Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville, SC, Brasil

Emails: [*alexandre.paulino@udesc.br](mailto:alexandre.paulino@udesc.br); [*romainagassin@gmail.com](mailto:romainagassin@gmail.com)

Palavras-Chave: Sorção, pH, Rodamina B, Casca de Arroz, Biocarvão

Introdução

O Dia Mundial da Água, celebrado em 22 de março, destaca a importância da preservação dos recursos hídricos (1). É vital lidar com a crescente pressão sobre a água, pois cerca de 4 bilhões de pessoas enfrentam escassez hídrica. A presença de corantes na água, como a rodamina B, tem impactos adversos no meio ambiente e na saúde humana devido à sua toxicidade. Além disso, esses corantes podem aumentar a demanda bioquímica de oxigênio, causar poluição estética e interferir na vida aquática. Para atender às regulamentações, é necessário desenvolver métodos de remoção eficientes e sustentáveis, como aqueles com o uso de biocarvão de casca de arroz obtido a partir da queima de casca de arroz com adição de hidróxido de sódio para retirada de sílica, porém, o rejeito do biocarvão é usado para adsorver a rodamina B (RB).

Resultados e discussão

Na Figura 1 é mostrado o efeito de pH na sorção da RB em biocarvão de casca de arroz.

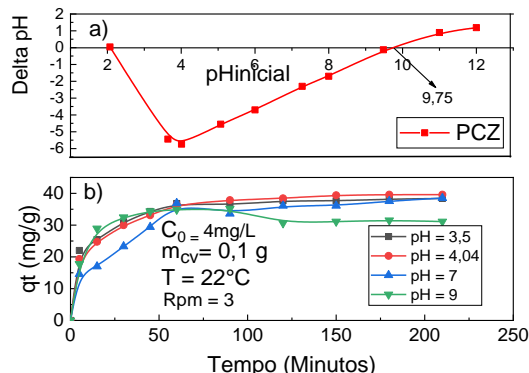


Figura 1. Efeito de pH na sorção de RB em biocarvão de casca de arroz e ponto de carga zero (PCZ) do material adsorvente.

A sorção da RB é influenciado pelo pH da solução. Quando o pH é menor que 9,75 (o PCZ do adsorvente), a superfície do material tem predominância de carga positiva, tornando-o eficaz na remoção de espécies

aniônica. A RB, um corante catiônico, deve ser então mais adsorvida em pH acima de 9,75 devido à sua forma zwitteriônica e predominância de ânions na superfície do adsorvente (2). A capacidade de sorção da RB aumentou quando o pH variou de 3,5 para 4,0, devido à presença de carga negativa na superfície do adsorvente e carga positiva na estrutura do corante. No entanto, a sorção diminui em pH superior a 4,0 devido à formação de íons hidratados de RB, dificultando sua entrada nos poros do adsorvente [3]. Estudos anteriores também relataram resultados semelhantes em materiais a base de carvão ativado (3).

Conclusões

Conclui-se que a sorção de RB é influenciada pelo pH da solução, afetando sua capacidade de sorção. Isso destaca a importância de ajustar cuidadosamente o pH ao usar biocarvão como adsorvente em diferentes contextos de remoção de contaminantes. Além disso, os resultados encontrados nesse estudo corroboram com estudos anteriores em carvão ativado, indicando uma tendência consistente nesse fenômeno.

Agradecimentos

CNPq (Processo: 313064/2022-9), FAPESC (Termo de outorga 2023/TR331), CAPES (Finance code 001)

Referencias e notas

- (1) Unesco, 2020. Disponível em: < <https://www.un.org> > Acesso em: 15 abr. 2020.
- (2) Ahmad, R.; Fumar, R.R. J. Environ. Management **2010**, 91, 1032-1038.
- (3) Lacerda, VS.; López-Sotelo, J.B.; Correa-Guimarães, A.; Hernández-Navarro, S.; Sánchez-Báscones, M.; Navas-Gracia, L.M.; Martín-Ramos, P.; Martín-Gil, J. J. Environ. Management, **2015**, 155, 67-76.

Determinação de metais e não metais em biomassa vegetal e bioetanol (1G e 2G) por espectrometria de absorção atômica/molecular e o uso de ferramentas quimiométricas

Leandro Kolling*¹ (PQ), Ágata L. G. da Silva¹ (IC), Ana Laura Neumann¹ (IC), Morgana B. Dessuy^{1,2} (PQ), Márcia Messias da Silva^{1,2} (PQ), Maria Goreti R. Vale^{1,2} (PQ), Jailson B. de Andrade² (PQ) *e-mail: mrleandror@gmail.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 91501-970, Porto Alegre, RS, Brasil

²Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia do CNPq, Universidade Federal da Bahia, 40170-115, Salvador, BA, Brasil

Palavras Chave: Energia renovável, Controle de poluentes, HR-CS GF AAS/MAS, Introdução direta, Moléculas diatômicas, Quimiometria

Introdução

No Brasil, o uso de biomassa na produção de biocombustíveis tem como principais benefícios diminuir a dependência de derivados de petróleo importados e reduzir as emissões de gases nocivos na atmosfera.¹ Nesse cenário, a produção de biocombustíveis a partir da biomassa de resíduos vegetais vem se destacando entre os setores industrial e governamental.¹

Um exemplo disso consiste no etanol de segunda geração (2G), o qual é uma fonte de energia sustentável e menos poluente. Diferente dos biocombustíveis de primeira geração (1G) que são produzidos a partir de culturas agrícolas alimentares (como cana-de-açúcar ou milho), óleo vegetal ou gordura animal, os biocombustíveis de segunda geração (2G) são produzidos a partir de culturas agrícolas não alimentares e resíduos florestais (bagaço de cana-de-açúcar, casca de arroz, casca de árvores, etc.).²

Contudo, para garantir a eficiência e a segurança no uso da biomassa e dos biocombustíveis, é necessário realizar um controle de qualidade rigoroso em todas as etapas da produção. Assim, o objetivo desse trabalho foi desenvolver metodologias analíticas rápidas, precisas e exatas para a determinação de diferentes analitos (metais e não metais) de forma direta por HR-CS GF AAS/MAS, sendo proposta a determinação de íons cloreto e sulfato em etanol combustível (1G e 2G) e a determinação simultânea de Pb e Al em biomassa vegetal. Os estudos realizados foram feitos de forma multivariada e os resultados obtidos foram tratados mediante o uso de ferramentas quimiométricas para fins de classificação e identificação.

Resultados e discussão

O espectrômetro de absorção atômica de alta resolução com fonte contínua e forno de grafite modelo contrAA 700 (AnalytikJena) foi empregado para a quantificação dos analitos.

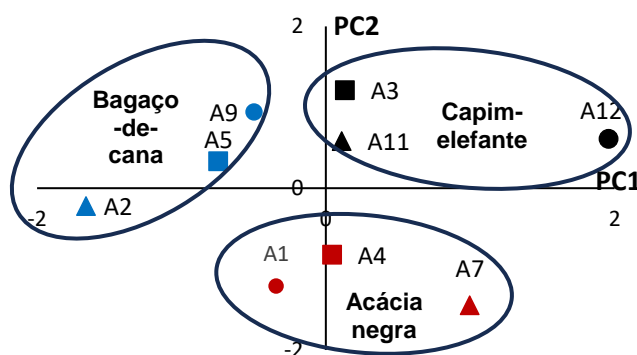


Figura 1. Classificação não-supervisionada das amostras (A1–A12) de biomassa por análise de componentes principais (PCA)

As concentrações dos analitos encontradas nas amostras de biomassa (A1–A12) estavam no intervalo de 0,1 e 1,7 mg kg⁻¹ Pb e de 0,3 e 1,2 mg kg⁻¹ Al. Enquanto que o intervalo de concentração dos íons em etanol combustível ficou entre 0,6 e 2,0 mg kg⁻¹ Cl⁻ e entre 0,6 e 1,5 mg kg⁻¹ SO₄²⁻, sendo os valores concordantes com os obtidos por métodos de referência. Na Figura 1 é apresentada a projeção de nove amostras de biomassa no plano das componentes PC1 e PC2 permitindo a classificação por grupos.

Conclusões

Portanto, foi possível realizar a determinação de diferentes analitos, sendo empregadas algumas ferramentas quimiométricas para a otimização e classificação das amostras.

Agradecimentos

Ao CNPq pelo fomento à pesquisa e ao INCT de Energia e Meio Ambiente pelas amostras cedidas

Referências e notas

- (1) Seabra, J. E. A.; et al. *Energy Policy* **2011**, 39 (1), 421–428.
- (2) Kesharwani, R.; et al. *Appl. Energy* **2019**, 242, 1467–1496.

Identificação de produtos de transformação de ATZ, CBZ, e SMX gerados em processos oxidativos avançados utilizando metodologia baseada em *suspect screening*

Vitor Mumbach Nilson^{1*} (IC), Suzan Zilli² (PG), Salatiel Wohlmuth da Silva² (PQ), Tânia Mara Pizzolato¹ (PQ), Mariana Roberto Gama Sato¹ (PQ).

*vitor2003nilson@gmail.com

¹Laboratório de Química Analítica e Ambiental (LQAA), Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Av. Bento Gonçalves, 9500, Agronomia, Porto Alegre, Rio Grande do Sul (RS)

²Instituto de Pesquisas Hidráulicas (IPH), Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Av. Bento Gonçalves, 9500, Agronomia, Porto Alegre, Rio Grande do Sul (RS)

Palavras Chave: *Suspect screening*, Produtos de transformação, Espectrometria de massas, Processos oxidativos avançados, LC-QTOF-MS

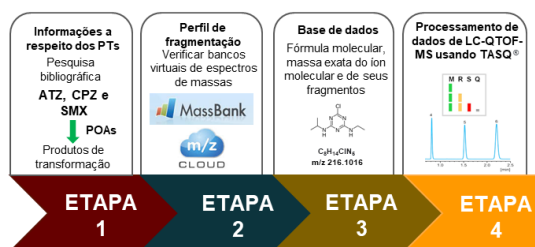
Introdução

Contaminantes emergentes (CE) são compostos de interesse ambiental comumente encontrados em águas subterrâneas e superficiais, como resultado da ação antrópica. Entre os CE estão fármacos, agrotóxicos, hormônios etc. A atrazina (sigla ATZ, herbicida), o sulfametoxazol (sigla SMX, antibiótico), a carbamazepina (sigla CBZ, antiepiléptico) são exemplos de CE amplamente utilizados. Nos últimos anos o número de estudos nesta área cresceu em decorrência dos potenciais danos que a exposição prolongada a baixas concentrações de CE pode causar à saúde humana. A degradação destes compostos nos processos de tratamento de água, ou até mesmo pela radiação solar no leito de corpos d'água, torna-se um agravante, uma vez que pode gerar produtos de transformação (PTs) os quais poucas informações se têm. Sob esta perspectiva, a cromatografia líquida acoplada à espectrometria de massas de alta resolução é a ferramenta mais utilizada na identificação de PTs. A metodologia do presente trabalho, fundamentada nos critérios de Schymanski et al. [1], permite a detecção dos compostos a partir de uma base de dados contendo informações da literatura e de bancos virtuais de espectros de massas sobre PTs comumente formados em processos oxidativos avançados, utilizando o software TASQ® (*Target Analysis Screening Quantification*).

Resultados e discussão

Utilizou-se base de dados contendo informações como fórmula estrutural, fórmula molecular e massa exata do íon molecular e dos fragmentos de maior intensidade dos possíveis PTs da ATZ, SMX e CBZ presentes nas amostras. Estes dados alimentaram o software TASQ®, que permitiu identificar os principais PTs. Amostras sintéticas contendo ATZ, SMX e CPZ,

foram submetidas a irradiação UV e cloração. A indicação dos possíveis PTs, levou em consideração: a avaliação do erro da massa exata do íon molecular e dos fragmentos, o tempo de retenção, a correspondência ao perfil isotópico (mSigma), a confirmação dos íons qualificadores e a reincidência dos resultados em



diferentes amostras.

Figura 1. Fluxograma da metodologia empregada para identificação dos produtos de transformação

Foram identificados 19 PTs para os três contaminantes estudados, com erros de massa menor que 13 ppm e mSigma menor que 60.

Conclusões

Foi possível estabelecer metodologia que permite a detecção de diversos PTs de ATZ, CBZ e SMX, com significativa confiabilidade, em amostras submetidas a UV e cloração.

Agradecimentos

CAPES, CNPq e IQ-UFRGS.

Referencias e notas

- (1) Schymanski, E. L., Jeon, J., Guille, R., Fenner, K., Ruff, M., Singer, H. P., & Hollender, J. *Environmental Science & Technology*, 48(4), 2097-2098, 2014

Efeito da etapa de purificação na porosidade do Biochar - Extração Soxhlet vs Ultrassom

Maria Alice Farias da Silva Amaral¹ (IC)*, Ana Paula Stefanelo e Silva ¹(PG), Christiane Lopes Leite,(IC), Mirian Dosolina Fusinato ¹(PG). Pedro José Sanches Filho ¹(PQ)

Palavras Chave: (Casca de arroz, Biochar, Adsorção, Porosidade, Pirólise).

¹instituto Federal Sul Rio-grandense -Pelotas/RS. *mariaaliceamaral34@gmail.com

Introdução

O crescente interesse na busca por materiais carbonáceos eficientes e sustentáveis tem levado à exploração de diversas fontes, incluindo resíduos agrícolas, para a produção de Biochar (BC). A purificação do Biochar é uma etapa essencial para liberar os sítios ativos impregnados com composto voláteis, gerados no processo de carbonização da biomassa, que neste estudo foi a pirólise da casca de arroz.⁽¹⁾ Durante esta etapa mudanças na superfície podem ocorrer e podem ser avaliadas através de estudo na porosidade do BC. Nesse contexto, este estudo busca comparar os efeitos de dois métodos de purificação, por extração com solvente em Soxhlet (Sox) e sob ultrassom(US), na porosidade do Biochar obtido por pirólise lenta a partir da casca de arroz (CA).

Resultados e discussão

O (BC) utilizado neste trabalho foi obtido por pirólise de 100g da CA em reator de leito fixo aquecido a 600°C por 10 min⁻¹ e fluxo de nitrogênio com vazão de 60 mL. min⁻¹ com taxa constante de aquecimento de 30°C.min⁻¹ A purificação foi realizada por extração de massa BC granular (diâmetro entre 0,125 e 0,25mm), com mistura Hexano/ acetona (1:1), em (Sox) 200 ml por 12 horas e em banho (US) 3 X de 200 ml por 15 minutos cada ciclo). Utilizou-se o Índice de Azul de Metileno (AM) para determinação dos mesoporos e o Índice de Iodo para os microporos. A massas de BC foram agitadas com as soluções de concentração conhecidas (0,2g de BC em 25 a 1000mg L⁻¹ de AM e 1,0g de BC com 100ml de solução de Iodo 0,1 N⁽²⁾). Após agitação a solução residual foi avaliada por espectrofotometria no UV-VIS para o AM e por titulação com tiosulfato de Sódio para o Iodo. Para cálculo da Mesoporosidade o q máx, foi obtido a partir do inverso do coeficiente linear do modelo linearizado de Langmiur, que teve um ajuste de 0,968 para o BC limpo por (Sox), e 0,994 para o BC limpo por US⁽³⁾. A tabela apresenta a porosidade para o BC em função do dois métodos.

Tabela 1. Avaliação da Porosidade do Biochar

	Microporos mg de I ₂ /g de BC	Mesoporos mg de AM/g de BC
US	340 ± 1,4%	8,3
Sox	371 ± 4,4%	9,6

Conclusões

A análise comparativa entre os métodos de purificação do BC demonstrou uma pequena diferença na superfície deste, a extração sob ultrassom levou a uma leve redução dos meso e microporos do BC. Estudo adicionais como BET e MEV poderão elucidar melhor estes dados preliminares. Considerando o baixo consumo de solvente do (Sox) em relação ao (US) e nível a redução do meso e microporos optou-se pelo Soxhlet na purificação do BC.

Agradecimentos

Agradecemos à PROPESP –IFSUL e a FAPERGS

Referencias e notas

- (1)BATISTA, R. R.; GOMES, M. M. Produção de biochar a partir da pirólise de biomassa: perspectivas e experiências brasileiras. **Revista Ibero-Americana de Ciências Ambientais**, v. 12, n. 8, p. 321–339, 2021.
- (2)BORGES, W. M. S. et al. Carvão ativado de resíduo de madeira de candeia: produção, caracterização e avaliação do potencial adsorptivo. **Revista Virtual de Química**, v. 7, n. 6, p. 1952–1967, 2015.
- (3)DAWOOD, S.; SEN, T. K.; PHAN, C. Adsorption removal of Methylene Blue (MB) dye from aqueous solution by bio-char prepared from *Eucalyptus sheathiana* bark: kinetic, equilibrium, mechanism, thermodynamic and process design. **Desalination and water treatment**, v. 57, n. 59, p. 28964–28980, 2016.

Determinação por GC-MS de compostos orgânicos no resíduo da borra de neutralização no controle do processo de destilação numa indústria produtora de óleo de arrozDiego Gil de los Santos (FM)¹, Pauline K.Oliveira (PQ)², Adriano G.Spessato (PQ)³, Gabriela R.L.Mendes (PQ)³, Pedro J. Sanches(FM)¹ e-mail: diegogil@ifsul.edu.br¹ Instituto Federal de Educação Ciência e Tecnologia Sul-rio-grandense,² Heinz Kraft, ³Indústria Riograndense de Óleos Vegetais (IRGOVEL)

Palavras Chave:ácidos graxos, esterese,cromatografia

Introdução

No refino do óleo de arroz a borra formada na etapa de neutralização é rica em compostos nutracêuticos, como γ -orizanol – antioxidante natural-, fitosteróis, tocoferóis - constituintes da vitamina E, ácidos graxos, dentre outros (Pestana et al, 2008). Esta borra ainda é destilada para a separação dos ácidos graxos, gerando-se um resíduo da destilação da borra de neutralização (RDBN) sem valor comercial. Neste trabalho determinamos os compostos orgânicos no RDBN avaliando a eficiência do processo destilação.

Coletaram-se quatro amostras em dias diferentes do RDBN. As amostras foram fracionadas pelo método SARA (Sanches Filho, *et. al.*, 2017), adicionados 100 μ L do derivatizante MSTFA aos extratos diretamente no vial para análise por GC. Colocados em um banho de areia a 80°C por trinta minutos e o volume ajustado a 1,0 ml injetando-se 1,0 μ l para avaliação por cromatografia gasosa monodimensional com detector de espectrometria de massas do tipo quadrupolar (GC/MS). Os compostos foram identificados comparando os espectros de massas, aos dados da biblioteca do equipamento (NIST, 2012) e, também, correlacionando os tempos de retenção das amostras com os padrões. Apenas os picos com similaridade acima de 80% e área maior que 0,1% foram considerados.

Resultados e discussão

A presença de ácidos graxos nos resíduos 1, 2 e 4 sugere instabilidade no processo de operação na etapa de destilação do processo de refino de óleo de arroz representando perda na comercialização de ácidos graxos destilados pela indústria. Os AGs que se destacaram nos resíduos foram os de cadeia longa, como o C20:0, C22:0 e C24:0 saturados e o C18:2, C20:1 e C22:1 insaturados. Identificou-se também, álcoois, ésteres, esteróis, destacando-se, o β -Sitosterol, o campesterol e o estigmasterol, classificados como fitosteróis os quais apresentam valor comercial e o estigmastan-3,5-dieno. Diferenças na composição

percentual dos resíduos podem ser explicadas em virtude das variedades das culturas de arroz, do beneficiamento dos grãos e dos parâmetros empregados no processamento do óleo de farelo de arroz (Scavariello *et. al.*, 2004). Na literatura consultada não se encontram dados referentes a caracterização completa do RDBN aqui apresentada.

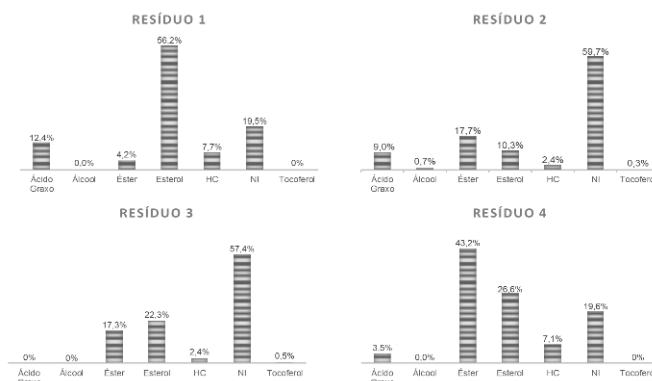


Figura 1 - Distribuição percentual das famílias químicas (*HC:hidrocarbonetos,NI:não identificados)

Conclusões

O processo de destilação da borra de neutralização apresenta instabilidade sendo composto por ácidos graxos, álcoois, ésteres e esteróis com valor comercial se extraídos.

Agradecimentos

FAPERGS, IRGOVEL, IFSUL

Referencias e notas

- (1) Sanches Filho PJ, Silveira LA, Betemps GR, Montenegro GO, Sampaio DM, Caramão EB, Application of the SARA method for determination of hydrocarbons by GC/qMS in bio-oil obtained by fast pyrolysis of rice husk. *Microchemical Journal*, [s. l.], v. 135, p. 226–238, 2017.
- (2) Pestana, V.R., Zambiasi, R.C., Mendonça, C.R.B., Bruscatto, M.H., Lerma-García, M.J., Ramis-Ramos, G. *J Am Oil Chem Soc*, 85:1013–1019, 2008.
- (3) Scavariello, E. M. S.; Barrera-Arellano, D. Optimización del proceso de acidulación de la borra de neutralización de aceite de salvado de arroz. *Grasas y Aceites*, v. 55, n. 2, p. 155-159, 2004.

DETERMINAÇÃO DE CONTAMINANTES EMERGENTES EM AMOSTRAS DE CHORUME

Sthefanie Lopes do Valle (IC)^{1*}, Sergiane C. Barbosa (PQ)¹, Verônica S. Borba (PQ)¹, Jônatas Külzer (IC)¹, Luciana T. Oliveira (IC)¹, Anna Carolina N. Meireles (IC)¹, Ednei Gilberto Primel (PQ)¹. *sthefanievalle@gmail.com

¹Universidade Federal do Rio Grande, Laboratório de Análise de Compostos Orgânicos e Metais (LACOM), Rio Grande, Rio Grande do Sul, Brasil, 96203-900

Palavras Chave: Chorume, Bisfenol-A, Cafeína, SILLME, HPLC-DAD, Contaminantes Emergentes.

Introdução

O chorume de aterros sanitários é formado pela percolação de água através de aterros, onde interage com os resíduos em um ambiente anaeróbico, concentrando matéria orgânica e compostos inorgânicos e orgânicos produzidos por atividades antropogênicas, como os contaminantes emergentes (CEs) (1). Entre os CEs estão a cafeína e o bisfenol-A.

A cafeína é um composto alcaloide que é encontrado em diversas matrizes, como café, chás e guaraná (2). Já o bisfenol-A é amplamente utilizado na fabricação de plásticos de policarbonato e resinas epóxi (3). Devido às dificuldades de extração em matrizes como o chorume, e à necessidade de determinação desses compostos em baixas concentrações, se faz necessária uma etapa de preparo de amostra eficaz de forma que os analitos sejam extraídos da matriz e pré-concentrados (4).

Dentre as técnicas empregadas para extração de diferentes compostos em amostras aquosas, destacam-se as técnicas de microextração como a Microextração Líquido-Líquido Assistida pelo Efeito *Salting-out* (SILLME), a qual utiliza pequeno volume de solvente com baixa toxicidade e não demanda materiais de alto custo (5).

Com base nestas informações o objetivo deste estudo foi padronizar um método analítico, seguindo os padrões da química verde, para determinação de CEs em amostras de chorume.

Resultados e discussão

As determinações cromatográficas foram realizadas em um Cromatógrafo a Líquido Waters (EUA) com detector por Arranjo de Diodos 2996. A separação cromatográfica foi realizada em uma coluna analítica Synergi 4 µm Fusion-RP 80Å (250 x 4,6 mm) com uma vazão de 1 mL min⁻¹, com tempo total de análise de 20 min. Foi empregado modo de eluição por gradiente, o qual variou de 60% água ultrapura e 40% metanol (MeOH) até 20% água ultrapura e 80% MeOH. Para a extração foram avaliadas diferentes técnicas e a SILLME apresentou as melhores recuperações (entre 40 e 100%).

A técnica SILLME foi padronizada para determinar as melhores condições de pré-concentração e extração dos analitos. Avaliou-se os diferentes tipos de sais (Na₂CO₃, MgSO₄ e (NH₄)₂SO₄), a quantidade de sal (de 1,0 a 3,0 g), o pH da amostra (de 2 a 6), e o volume de amostra (5 ou 10 mL).

A condição que apresentou recuperações entre 40 e 120% conforme o guia de validação do INMETRO (6), foi a que utilizou: 5 mL de amostra pH 3 e 1 mL de acetonitrila, 2 min de agitação e adição de 2,0 g de Na₂CO₃. Mais 2 min de agitação e depois 5 min na centrífuga a 3000 rpm.

O método foi validado e os Limites de Quantificação variaram entre 0,02 e 0,1 mg L⁻¹, e a curva analítica apresentou r²>0,99. A exatidão e precisão, avaliadas em três níveis, apresentaram recuperação entre 69 e 115% e RSD entre 3 e 19% (Tabela 1).

Tabela 1. Resultados dos testes de exatidão e precisão.

COMPOSTOS	REPETIBILIDADE					
	0,1 mg L ⁻¹		0,2 mg L ⁻¹		0,4 mg L ⁻¹	
	R(%)	RSD	R(%)	RSD	R(%)	RSD
CAFEÍNA	85	3	73	19	71	12
BISFENOL A	91	18	93	5	75	3
COMPOSTOS	PRECISÃO INTERMEDIÁRIA					
	0,1 mg L ⁻¹		0,2 mg L ⁻¹		0,4 mg L ⁻¹	
	R(%)	RSD	R(%)	RSD	R(%)	RSD
CAFEÍNA	89	3	93	5	75	3
BISFENOL A	102	9	115	5	69	18

Conclusões

O método proposto é eficiente para a extração de cafeína e bisfenol-A de amostras de chorume, apresentando as vantagens de ser rápido, consumir baixo volume de solvente e gerar pouco resíduo.

Agradecimentos

Agradecemos ao Programa Institucional de bolsas PROBIC/FAPERGS, PIBIC/CNPq, EQA – FURG.

Referências e notas

- (1) Clarke, B. O. et al. *Chemosphere* **2015**, 127, 269.
- (2) Yousefi, S. et al. *Anal. Meth.* **2017**, 9, 1665.
- (3) Wang, Dong-xu et al. *Food Anal. Meth.* **2021**, 14, 441.
- (4) Piao, C. et al. *J. Chromatogr. B* **2014**, 969, 139.
- (5) Du, D. et al. *Anal. Meth.* **2014**, 6, 6973.
- (6) INMETRO. Brasília: Instituto Nacional de Metrologia, Normalização e Qualidade Industrial. DOQ-CGCRE-008: Orientações sobre validação de métodos analíticos, **2020**.

DETERMINAÇÃO DE CONTAMINANTES EMERGENTES EM FRUTOS DO MAR

Jônatas Külzer (IC)^{a*}, Paula Lima (IC)^a, Sergiane C. Barbosa (PQ)^a, Lucas Marcolin (PG)^a, Anna Carolina Meireles (IC)^a, Sthefanie do Valle (IC)^a, Luciana T. Oliveira (IC)^a, Verônica S. Borba (PQ)^a, Ednei G. Primel (PQ)^a

^aUniversidade Federal do Rio Grande, Laboratório de Análise de Compostos Orgânicos e Metais (LACOM), Rio Grande, Rio Grande do Sul, Brasil, 96203-900

Palavras Chave: Contaminantes Emergentes, LC-MS/MS, Pescados, PPCPs, QuEChERS

Introdução

Os fármacos e produtos de cuidado pessoal (PPCPs) compõem uma das principais classes de contaminantes de preocupação emergentes, eles são constantemente detectados no meio ambiente, possuem potencial de toxicidade e em sua maioria não estão incluídos em legislações ambientais (1). Os PPCPs estão presentes em medicamentos humanos e veterinários, e nos produtos de cuidado pessoal, como filtros solares, fragrâncias, repelentes, entre outros. Devido ao alto consumo destes compostos, há diversos meios de entrada no ambiente aquático, como descarte inadequado de resíduos residenciais, industriais e hospitalares, os efluentes das estações de tratamento de esgoto (ETEs) e as fazendas de aquicultura, onde é comum a utilização de fármacos (2). Os PPCPs apresentam características de pseudo-persistência, bioacumulação e desregulação endócrina, representando um risco para a saúde dos organismos aquáticos e também dos seres humanos, uma vez que muitas vezes consomem frutos do mar *in natura* (3).

Com base nestas informações este estudo visa padronizar um método analítico para determinação de PPCPs em frutos do mar (salmão, ostras e mexilhão).

Resultados e discussão

Após revisão bibliográfica, 17 PPCPs (antibióticos, anti-inflamatórios, antissépticos, conservantes, antibacterianos, plastificantes, filtros UV, estimulantes, anti-hipertensivos e anticonvulsivantes) foram incluídos no método. Para a detecção foi utilizada a Cromatografia Líquida acoplada a Espectrometria de Massas em série (LC-MS/MS). Os parâmetros de detecção como modo de ionização, voltagem do cone e energia de colisão, assim como a coluna cromatográfica e a composição da fase móvel foram avaliados. Para a extração dos PPCPs foram avaliados os métodos QuEChERS Original, Citrato e Acetado. Após, a massa de amostra e dos sais, volume de solvente extrator e a etapa de limpeza foram estudados.

As condições padronizadas para o LC-MS/MS incluíram a utilização da coluna analítica C18 (100 mm x 2,0 mm, 2,5 µm, Phenomenex) e a fase móvel composta por CH₃CN e água ultrapura, ambas acidificadas com 0,1% de CH₃COOH. Já a extração foi estabelecida com o método QuEChERS original, utilizando 2,5 g de amostra com 10 mL de CH₃CN para a extração, 2,0 mg de MgSO₄ e 0,5 g NaCl na partição e 50 mg de quitina com 150 MgSO₄ para a limpeza.

O método foi validado seguindo as figuras de mérito estabelecidas pelo INMETRO. Os Limites de detecção e de quantificação (LQ) ficaram na faixa de 0,6 a 120,1 ng g⁻¹ e 2 a 400 ng g⁻¹, respectivamente. Os coeficientes de correlação foram superiores a 0,9902, e as recuperações para os três níveis de fortificação ficaram entre 49 e 120% com desvio padrão relativo (RSD) ≤20%. Estes valores indicam que o método é confiável, preciso e exato, além de possuir LQs similares aos demais métodos encontrados na literatura.

Conclusões

Um método multi-resíduos para a determinação de PPCPs em frutos do mar empregando QuEChERS seguido de detecção por LC-MS/MS foi proposto. O método permitiu análise simultânea de 17 PPCPs de diferentes classes terapêuticas, e apresentou valores para as figuras de mérito dentro do aceitável pelos guias de validação.

Agradecimentos

Agradecemos ao Programa Institucional de bolsas PROBIC/FAPERGS, PIBIC/CNPq, EQA – FURG

Referencias e notas

- (1) Chaves, M.; Külzer, J.; Lima, P. R. P.; Barbosa, S. C.; Primel, G. E. *Environ. Sci. Process. Impacts* **2022**, *24*, 1982.
- (2) Ebele, A. J.; Abdallah M. A.; Harrad, S. *Emerg. Contamin.* **2017**, *3*, 1.
- (3) Ribas, L. C. J.; Sherry, P. J.; Zampronio, R. A.; Assis, H. C. S.; Simmons, D. B. D. *Environ. Toxicol. Chem.* **2017**, *36*, 2092.

Análise de crisina em folhas, polpa e casca de *Passiflora caerulea* por método QuEChERS modificado e HPLC-DAD

Carlos Borges Filho^{1,2} (PG), Magali Kemmerich¹ (PQ), Cristiano Ragagnin de Menezes² (PQ), Caroline Tuchtenhagen Rockembach^{1*} (PQ)

carolinerockembach@unipampa.edu.br

¹ Universidade Federal do Pampa, Grupo de Pesquisa em Cromatografia e Análise de Alimentos, Itaqui, RS, Brazil.

² Universidade Federal de Santa Maria, Centro de Ciências Rurais, Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia dos Alimentos, Santa Maria, RS, Brazil

Palavras Chave: cromatografia, preparo de amostra, maracujá

Introdução

A crisina, um flavonoide pertencente à classe das flavonas, tem suscitado crescente interesse devido aos seus diversos e promissores efeitos bioativos, que incluem propriedades antioxidantes, anticonvulsivantes, anti-hipertensivas, anti-inflamatórias, antineoplásicas e antidepressivas¹. Este composto é encontrado de forma natural no mel e em algumas espécies de plantas, entre as quais se destaca a *Passiflora caerulea*, uma planta abundante na América do Sul, porém pouco explorada para consumo humano ou outros fins. Assim, este trabalho visa desenvolver e validar um método de determinação de crisina em folhas, polpa e casca de *Passiflora caerulea*, por um método simples e eficaz.

Resultados e discussão

Para este estudo utilizou-se equipamento da Thermo Scientific Dionex UltiMate Série 3000. Após vários testes, as condições cromatográficas foram fixadas em: coluna Dionex HPLC Acclaim 120 C18 5 µm 4,6 x 150 mm, forno a 25 °C, comprimento de onda 265 nm, fase móvel em gradiente, contendo água ultrapura e acetonitrila, vazão de 0,5 mL/min e tempo total de corrida de 20 min. O preparo da amostra foi estabelecido através de modificação do método QuEChERS original² e consiste em: a) extração com 5 g (folha) ou 10 g (polpa e casca) de amostra e 10 mL de acetonitrila; b) partição com 4 g de MgSO₄ e 1 g de NaCl; c) limpeza de 1 mL de sobrenadante com 25 mg de SiO₂ e 150 mg de MgSO₄. A linearidade foi estabelecida em uma ampla faixa de concentração, com $r^2 > 0,990$ para todas as matrizes. Além disso, efeito da matriz (EM) foi observado, variando de forma negativa nas folhas e positiva na polpa e casca. Assim, a quantificação foi realizada em curva preparada no extrato da matriz. Precisão e

exatidão do método foram satisfatórias, com recuperações na faixa de 73% a 101% e RSD ≤ 15%. Os limites de quantificação (LOQ) foram estabelecidos em 0,08 mg kg⁻¹ para folhas, 0,01 mg kg⁻¹ para polpa e 0,014 mg kg⁻¹ para casca. Amostras de *Passiflora caerulea* foram analisadas e os níveis mais elevados de crisina foram observados na folha e na casca.

Conclusões

A pesquisa demonstrou que a *Passiflora caerulea*, pode ser uma fonte viável de crisina. A adaptação e validação do método QuEChERS seguido de análise por HPLC-DAD permitiu a quantificação precisa da crisina em diferentes partes da planta de forma rápida e eficiente. Portanto, este estudo abre perspectivas para sua utilização em pesquisas bioquímicas e possíveis aplicações na indústria de alimentos.

Agradecimentos

UNIPAMPA e UFSM.

Referências e notas

- (1) Borges Filho, B.; Jesse, C. R.; Donato, F.; Del Fabbro, L.; Gomes, M. G. de; Goes, A. T. R.; Souza, L. C.; Boeira, S. P. *Chemico-Biological Interactions*, **2016**, 260, 154-162.
- (2) Anastassiades, M.; Lehotaý, S.; Stajnbaher, D.; Schenck, F. J.; J. AOAC Int. **2003**, 83, 412.

Estabelecimento de método para determinação de hormônios e fármacos em água por SPE e UHPLC-MS/MS

Caroline G. Ibarro (IC)^{1*}, Luana D. da Silveira (IC)¹, Júlia A. de Oliveira (PG)¹, Osmar D. Prestes (PQ)¹, Martha B. Adaime (PQ)¹, Renato Zanella (PQ)¹.

*caroline.grings@acad.ufsm.br

¹Laboratório de Análise de Resíduos de Pesticidas (LARP), Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria

Palavras Chave: Água, Produtos Farmacêuticos, UHPLC-MS/MS

Introdução

Produtos farmacêuticos e hormônios são continuamente liberados no meio ambiente, principalmente por meio de efluentes domésticos e hospitalares não tratados, processos de fabricação e descarte incorreto de medicamentos¹. As propriedades físico-químicas dos fármacos associados às características do meio receptor proporcionam o transporte e distribuição desses compostos através da água, solo ou sedimentos. A crescente produção e o uso intensivo de fármacos e hormônios mostram a importância do estudo da ocorrência e dos efeitos desses poluentes no meio ambiente. Neste contexto, são necessários métodos analíticos para determinar estes compostos em amostras de água. Assim, o objetivo deste trabalho foi avaliar as melhores condições experimentais para a determinação de fármacos (tetraciclinas, sulfonamidas, quinolonas, lincosamidas, benzimidazóis) e hormônios em água por extração em fase sólida (SPE) e UHPLC-MS/MS.

Resultados e discussão

A avaliação das condições de SPE consistiu na comparação dos sorventes Oasis HLB 60 mg/3 mL, Strata-X 200 mg/3 mL, Bond Elut C18 200 mg/3 mL e Bond Elut Nexus 60 mg/3 mL, ajuste do pH da amostra, adição de EDTA e solventes de eluição (metanol, acetonitrila, acidificados ou não). Para o procedimento de SPE foram percolados 100 mL de amostra e para eluição foram utilizados 2 mL de solvente. Os extratos foram diluídos 2x em água ultrapura antes da determinação por UHPLC-MS/MS. As condições escolhidas para a validação do método foram: cartucho polimérico Strata-X 200 mg/3 mL, sem ajuste de pH, adição de 0,1 g de EDTA e eluição com a mistura de acetonitrila e metanol (1:1, v/v) acidificada com 1% (v/v) de ácido acético. A utilização do EDTA foi necessária

para obter melhores recuperações para os grupos tetraciclinas e quinolonas.

O método foi validado avaliando LOD e LOQ, seletivamente, linearidade, precisão e exatidão. A faixa linear foi de 0,02 a 4 µg L⁻¹ para a maioria dos analitos, com $r^2 \geq 0,99$. Todos os compostos apresentaram valores de LOD e LOQ de 0,06 e 0,2 µg L⁻¹, respectivamente. Os estudos de exatidão e precisão foram avaliados nos níveis 0,2, 0,5 e 1,0 µg L⁻¹. Para todos os compostos e níveis, os valores de recuperação foram de 72 a 119% com RSD < 17%.

Conclusões

O método proposto baseado em SPE e UHPLC-MS/MS foi eficaz para a determinação de 26 compostos em água. A qualidade e confiabilidade dos resultados obtidos foram garantidas através da validação que garantiu adequada precisão e exatidão do método analítico.

Agradecimentos

UFSM, CNPq, CAPES e FAPERGS

Referencias e notas

- (1) KHAN, H. K.; REHMAN, M. Y. A.; MALIK, R. N. Fate and toxicity of pharmaceuticals in water environment: an insight on their occurrence in South Asia. *Journal of environmental management*, v. 271, n. 1, p. 1-19, 2020.

Proposta de Filtros de Cinzas de Casca de Arroz: um Caminho para a Purificação da Água

Patricia da Rosa Lira¹ (PG)*, Paola Lira¹ (PG), Jacson Menezes¹(PQ), Chiara Valsecchi¹(PQ). E-mail: patricialira.aluno@unipampa.edu.br

Universidade Federal do Pampa.

Palavras Chave: Biossorvente, Sustentabilidade, Cinza da casca de arroz, Adsorção.

Introdução

Resíduos agrícolas como a casca de arroz representam um problema ambiental e econômico significativo na região Sul e Oeste do país, onde a produção de arroz é predominante. A cada safra, milhões de toneladas são descartadas no meio ambiente, não tendo um destino bem definido [1]. Além disso, o Rio Grande do Sul possui 3 dos 10 rios mais poluídos do Brasil, segundo o IBGE [2].

Assim, neste estudo, foi empregada a cinza da casca de arroz, um resíduo agrícola importante na região, como adsorvente para remover o micropoluinte 2-nitrofenol em soluções aquosas. Após verificar a eficácia de remoção, foi proposto um protótipo de filtro de cinza da casca de arroz em formato de traveseiro.

Resultados e discussão

A cinza da casca de arroz foi caracterizada por diversas técnicas analíticas, como fluorescência de raio-X (FRX), MEV, e isotermas de adsorção-desorção de nitrogênio (BET), ponto de carga zero, hidrofobicidade e espectroscopia FT-IR antes e depois da adsorção. A eficiência de remoção do micropoluinte foi avaliada por isotermas de equilíbrio de adsorção, otimizando o processo por meio do ajuste do pH da solução, e estudo da eficiência de remoção (Figura 1).

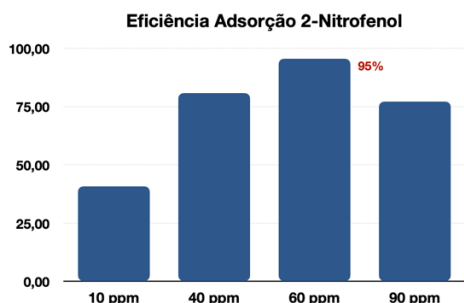


Figura 1. Eficiência de adsorção para o 2-nitrofenol em diferentes concentrações iniciais.

A cinza demonstrou uma boa remoção, até 95%, para concentrações iniciais entre 30 e 90 ppm. O Q_{max} segundo o modelo de isoterma de adsorção de

Langmuir foi encontrado de 6,01 mg/g para este material.

O protótipo de filtro proposto foi fabricado nas dimensões de 8 x 10 cm, conforme Figura 1, e está sendo testado nas mesmas condições dos experimentos anteriores, usando diferentes tecidos (polipropileno, algodão e poliéster).

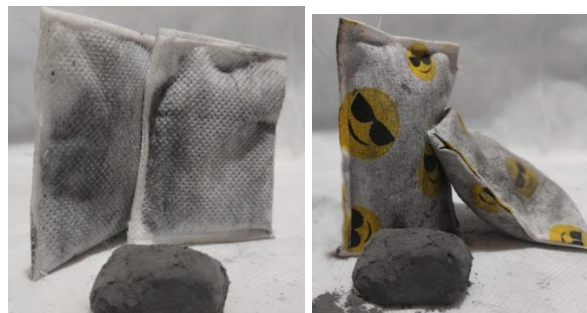


Figura 2. Proposta de filtros de cinza da casca de arroz em formato de traveseiros (poliéster e polipropileno)

Conclusões

Os resultados de remoção obtidos demonstram que é possível pensar na reutilização da cinza da casca de arroz como biossorvente para purificação das águas, agregando valor a um resíduo sem destino comercial.

Agradecimentos

Agradecemos a Fapergs (InovaCluster/2022) pelo suporte financeiro.

Referencias e notas

1. CONAB, Companhia Nacional de Abastecimento, *Safra 2021/2022, 7º levantamento, 2021*. Disponível em: <https://www.conab.gov.br/item/download>.
2. Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística – IBGE. Rio de Janeiro, RJ – Brasil. *Indicadores de Desenvolvimento Sustentável BRASIL 2021*. 2021. ISSN 1517-1450

Degradação de Venlafaxina via ozonização assistida por ultrassom

Renata Vieira** (IC), Luana Formagini^a (IC), Natália Rocha^a (IC), Gabriel Larruscahim^a (IC), Thiago Pereira^a (PG), Darliana Souza^a (PQ), Érico Flores^a (PQ).

*e-mail: renata.vieira@acad.ufsm.br

^aUniversidade Federal de Santa Maria, Departamento de Química, Santa Maria, RS, Brasil, 97 105-900.

Palavras Chave: Degradação, Ozonização, Psicofármacos, Venlafaxina, Ultrassom.

Introdução

A pesquisa sobre tratamento de efluentes está em crescimento, isso por conta da alta taxa de crescimento populacional e a constante demanda por produtos e serviços. Com isso, novos poluentes passam a ter grande importância nas pesquisas ambientais. Os fármacos são considerados poluentes emergentes, e seus resíduos em compartimentos ambientais, como lagos e rios podem causar mudanças fisiológicas graves em organismos que não são o alvo terapêutico, como peixes e invertebrados.¹

Estes fármacos são, geralmente, compostos recalcitrantes, que podem se manter estáveis no meio ambiente, como o ansiolítico Venlafaxina. Para a degradação desta molécula é necessário o uso de processos oxidativos avançados (PAOs). O PAO utilizado neste estudo foi a ozonização, uma técnica que se tornou muito importante para degradação e oxidação de compostos orgânicos recalcitrantes. Um dos principais desafios na ozonização para tratamento de efluentes, é a transferência de massa do ozônio do meio gasoso para o líquido. Energias alternativas, como ultrassom podem auxiliar a intensificação da transferência de massa do ozônio, aumentando a eficiência do processo.² De tal forma, o presente estudo foi planejado com a intenção de intensificar a ação do O₃ utilizando o ultrassom para uma degradação mais efetiva da Venlafaxina.

Ensaios de degradação da venlafaxina em esgotos hospitalares foram realizados em um reator de vidro encamisado, com capacidade de 500 mL. O ozônio foi produzido com o auxílio de um gerador comercial, e inserido no reator por meio de um difusor poroso. Ao reator foi acoplada uma sonda de ultrassom, operando em uma frequência de 20 kHz e potência dissipada de 30 W/L. A concentração da venlafaxina foi determinada por meio de cromatografia a líquido acoplada a espectrômetro de massas (LC-MS).

Resultados e discussão

Foram realizados ensaios para o teste de eficiência do ultrassom na degradação, com O₃ e ultrassom, somente O₃ e somente ultrassom. Durante esses ensaios foram coletadas alíquotas em diferentes tempos com objetivo de determinar a velocidade da degradação com e sem ultrassom.

Na Figura 1 estão apresentados os resultados de degradação nessas condições. O ultrassom aumenta a eficiência de degradação da venlafaxina. Após 10 minutos de reação foi observada a degradação de 90% do fármaco presente. Para o processo na ausência de ultrassom, valores semelhantes de degradação foram observados somente após 30 minutos de reação.

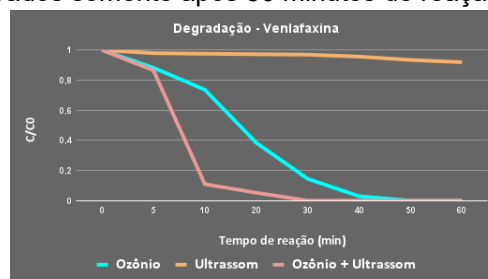


Figura 1. Concentração de venlafaxina pelo tempo de degradação.

Conclusões

O uso de O₃ combinado com ultrassom aumenta a eficiência de degradação da venlafaxina, diminuindo o tempo necessário de permanência sob borbulhamento de ozônio.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPERGS e UFSM.

- (1) Costa Junior, I. L.. Rev. Virtual Quim. **2014**, **5**, 1408-1431
- (2) Wua Z., Abramovac A., Nikonovc R., Cravotto G. Ultrason. Sonochem. **2020**, 68.

Hydrolysis of lipids in dairy wastewater using lipase incorporated in hydrogel

Amanda Magalhães das Neves¹ (PG), Luiz Jardel Visioli² (PQ), Heveline Enzweiler² (PQ), Alexandre Tadeu Paulino^{1,3*} (PQ)
 E-mail: [*alexandre.paulino@udesc.br](mailto:alexandre.paulino@udesc.br)

¹Santa Catarina State University, Postgraduate Program in Food Science and Technology, Br 282, Km 574, Linha Santa Terezinha, 89870-000, Pinhalzinho/SC, Brazil

²Santa Catarina State University, Department of Food and Chemical Engineering, Br 282, Km 574, Linha Santa Terezinha, 89870-000, Pinhalzinho/SC, Brazil

³Santa Catarina State University, Department of Chemistry, Rua Paulo Malschitzki, 200, Zona Industrial Norte, 89219-710, Joinville/SC, Brazil

Keywords: Hydrogel, Immobilization, Lipase, Wastewater

Introduction

Lipases are catalytic enzymes with diverse industrial applications and the potential for the degradation of lipids in wastewater from the dairy industry. Methods that employ lipases in the treatment of wastewater with a large fat content are much more efficient than conventional chemical and mechanical methods (1). However, the disadvantages of the use of enzymes include the high cost of the process and enzymatic denaturation (2). Such problems can be circumvented by the immobilization of lipase on hydrogels. This process can be performed using physical methods (adsorption, encapsulation and confinement) or chemical methods (reticulation and covalent ligation) (1). Pectin-based hydrogels are excellent options for the immobilization of enzymes due to the presence of reactive functional groups in their structures, which can interact with biological macromolecules, maintaining the molecules active during different applications (3). Therefore, the aim of the present study was to immobilize lipase in a pectin-based hydrogel for the degradation of lipids in dairy wastewater.

Results and discussion

Response surfaces revealed that the lipase immobilization capacity increased at temperatures close to 25°C, an initial enzyme concentration of 4.0 mg mL⁻¹ and pH close to 8.0 as Figures 1a-b.

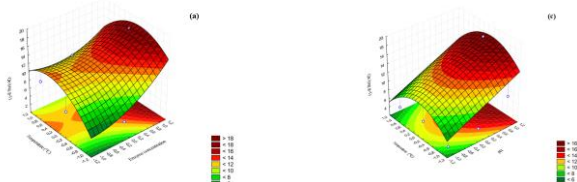


Figure 1 – Response surfaces and contour curves showing lipase immobilization capacity in pectin hydrogel under the effect of temperature, initial enzyme concentration and pH.

Significant storage stability was found of the immobilized enzyme and greater hydrolysis was found in the simulated synthetic wastewater with both the free and immobilized enzyme compared to the real wastewater of the dairy industry. Greater hydrolysis efficiency occurred after 120 min, with approximately 69.2 % ± 0.5 of free fatty acids produced. The enzyme immobilized in pectin hydrogel demonstrated greater potential for the reduction in organic pollution in the real wastewater compared to the simulated synthetic effluent. Such an improvement may be explained by the fact that the real wastewater had a lower organic matter content than the simulated synthetic wastewater used in the study.

Conclusion

The use of lipase immobilized in a pectin hydrogel as a catalyst is a more promising strategy for the treatment of wastewater from the dairy industry in comparison to methods that employ physical processes.

Acknowledgments

CNPq (Processo: 313064/2022-9), FAPESC (Termo de outorga 2023/TR331), CAPES (Finance code 001)

Referencias e notas

- (1) Nimkande, V.D.; Bafana, A. J. Water Process Eng. **2022**, 46, 102591.
- (2) Zou, B.; Yan, Y.; Xia, J.; Zhang, L.; Adesanya, I.O. Colloids Surf. B Biointerfaces **2020**, 195, 111275.
- (3) Lopes, L.C.; Simas-Tosin, F.F.; Cipriani, T.R.; Marchesi, L.F.; Vidotti, M.; Riegel-Vidotti, L.C. Carbohydr. Polym. **2017**, 155, 11–18.

DESENVOLVIMENTO DE MÉTODO PARA A DETERMINAÇÃO DE Cl EM BIOCARVÃO DE BIOMASSA LIGNOCELULÓSICA

Ana Luísa Seeger Machado¹(IC), Ana Luiza Garcia Mendes¹(PG), Alice Penteadó Holkem¹(PG), Thalyta Fonseca da Silva²(PG), Paola de Azevedo Mello¹(PQ)

*e-mail: seegeranal@gmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria

²Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de Santa Maria

Palavras Chave: Análise elementar, pirólise, biocarvão, biomassa lignocelulósica.

Introdução

A biomassa inclui todo rejeito ou subproduto sustentável, com potencial para a produção de insumos químicos e geração de energia. Pode ser convertida em bioprodutos (biocarvão, bio-óleo e biogás), por diferentes processos, dentre os quais, a pirólise. A composição química dos produtos é influenciada pelas características da biomassa utilizada e pelas condições de pirólise. Por isso, a caracterização química é de suma importância para avaliar o uso dos materiais para aplicação como fonte de energia ou outra distinta, bem como pode melhorar os processos de conversão. Algumas normas já foram estabelecidas, porém, há dificuldades em reproduzir os protocolos, dada a diversidade de amostras e sua composição diversa. Para o desenvolvimento do presente trabalho, amostras de biocarvão, obtidas através de um projeto em paralelo (consórcio BioValue, iniciativa Horizon 2020, LNBR, 2021), foram tratadas conforme documentos e protocolos oficiais. O método convencional utilizado para a determinação de Cl em amostras de biocarvão é descrito na norma EN ISO 16994. Porém, a norma preconiza um extenso preparo de amostra e utiliza reagentes tóxicos e ambientalmente impactantes. Com base nisso, o objetivo do trabalho foi desenvolver um método alternativo para a determinação de Cl, em consonância com a química analítica verde.

Resultados e discussão

Foi desenvolvido um método para determinação de Cl em biocarvão utilizando um analisador elementar (Multi EA 5000 Analytik Jena Analytical Instrumentation, Alemanha), o qual utiliza o princípio da coulometria para detecção, após combustão da amostra em um tubo aquecido, na presença de oxigênio e argônio, que

carreiam os gases gerados na queima até o sistema de detecção. Tal técnica não requer uma etapa prévia de tratamento da amostra, sendo esta analisada em seu estado sólido. As faixas de concentração para Cl variaram entre 10 e 250 $\mu\text{g g}^{-1}$. Para avaliar a exatidão do método, foi feita a análise direta do CRM NIST 1632c (carvão betuminoso).

Tabela 1. Resultados para Cl em biocarvão (n=3, média \pm desvio-padrão).

Amostra	Concentração de Cl (mg kg^{-1})
Biocarvão I	149 \pm 2
Biocarvão II	77,9 \pm 4,4
Biocarvão III	256 \pm 3
Biocarvão IV	111 \pm 8
CRM NIST 1632c	1261 \pm 170

Com base nos resultados, foi possível definir condições ótimas para uso da técnica de análise elementar para cloro em biocarvão, em níveis de ppm. É possível afirmar que diferentes biomassas proporcionam diferentes concentrações do analito nos produtos, bem como a influência das condições de pirólise.

Conclusões

O método proposto apresentou-se satisfatório para a determinação de Cl, visto que é um método simples, robusto e exato, além de dispensar pré-tratamento da amostra, alinhado ao contexto da química analítica moderna.

Agradecimentos

CNPq, BioValue, UFSM e LAQIA.

Referências

- (1) Santos, N. A. V., et al. Rev. Virtual Quim., Vol. 9, Nº 1, 2016.
- (2) Mohan, D. et al. Energy & Fuels, Vol. 20, 2006, 848-889.
- (3) Pankaj, K.K. et al. Trends in Analytical Chemistry, Vol. 42, 2013.

Determinação de Ferro em Cerveja por Espectrometria de Absorção Atômica por Chama após Microextração Líquido-Líquido Dispersiva

Andressa Danielli Weisbarch Villagram Martinez*¹(PG), Maiuca Alberto Seco¹(PG), Eliana Torres Freitas Larruscain¹(PG), Jader Rodrigo Kappaun Silveira¹(PG), Rochele Sogari Picoloto¹(PQ), Fábio Andrei Duarte¹(PQ).

*e-mail: andressa.martinez@acad.ufsm.br

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria.
 Palavras Chave: DLLME, Ferro, Cerveja, F AAS, Preparo de amostra.

Introdução

A cerveja é uma das bebidas alcoólicas mais consumidas mundialmente e no Brasil é a mais consumida¹. As principais matérias-primas usadas na fabricação da cerveja atualmente (água, malte, lúpulo e levedura) contribuem para sua composição de alta complexidade, devido à presença de proteínas, vitaminas, minerais, ácidos orgânicos como etanol, além de nutrientes como, Ca, K, Fe, P, Mg, Na². A alta concentração de Fe na cerveja interfere desde o processo de fabricação, onde o crescimento das leveduras é afetado, até o sabor do produto final. Devido à presença de compostos orgânicos na composição da cerveja, uma etapa de preparação da amostra é obrigatória. A microextração líquido-líquido dispersiva (DLLME) tem sido amplamente empregada nos últimos anos devido à sua eficiência para extração e seletividade, principalmente para posterior determinação elementar³ ou compostos orgânicos, uma vez que agrega vantagens como pré-concentração, miniaturização e baixo consumo de reagentes. Assim, o presente estudo tem como objetivo desenvolver um método simples, rápido e de baixo custo para posterior determinação de Fe por espectrometria de absorção atômica com chama (F AAS) após DLLME.⁴

Resultados e discussão

Para aplicação do método DLLME/F AAS proposto, foram analisadas 3 amostras, as quais também foram usadas para obtenção dos valores comparativos empregando como método de referência a decomposição assistida por micro-ondas (MAD) e determinação de Fe por espectrometria de emissão óptica com plasma indutivamente acoplado (ICP-OES). Os resultados mostrados na Tabela 1 evidenciam que o método proposto (DLLME/F AAS) apresentou concordâncias entre 104 e 119%, estando de acordo com as diretrizes de validação AOAC e ICH (75 a 125% e 80 a 120%, respectivamente) quando comparado com os resultados do método de referência (MAD/ICP OES).

Tabela 1. Determinação de Fe por ICP-OES após MAD (n = 3) e por F AAS após DLLME (n = 7). Os resultados expressam a média de Fe ($\mu\text{g L}^{-1}$) \pm desvio padrão.

Amostra	MAD/ICP-OES	DLLME/F AAS
A	57,2 \pm 5,4	68,2 \pm 5,6
B	89,3 \pm 2,7	93,7 \pm 12,3
C	54,5 \pm 2,1	59,7 \pm 3,2

Conclusões

A combinação das duas abordagens (DLLME e F AAS) apresenta diversas vantagens como simplicidade, custos operacionais relativamente baixos, alta recuperação, alto fator de pré-concentração e tempo reduzido para o preparo das amostras. O método proposto apresentou exatidão e precisão adequadas. Além disso, todas as amostras analisadas obtiveram concentrações de Fe acima do limite de quantificação ($9,0 \mu\text{g L}^{-1}$) sendo que os valores encontrados estão de acordo com a literatura. Por fim, este método pode ser aplicado em análises de rotina para determinação de Fe em cerveja, bem como em amostras com matrizes semelhantes.

Agradecimentos

CAPES, CNPq e LAQIA.

Referências

- (1) Neto, D. M. C.; Ferreira, L. L. P.; Sad, C. M. S.; Borges, W. S.; Castro, E. V. R.; Filgueiras, P. R.; Lacerda Jr, V. Conceitos Químicos Envolvidos na Produção da Cerveja: Uma Revisão. *Rev. Virt. Quim.* 2020, 12 (1), 120-147.
- (2) Polak, J.; Bartoszek, M.; Stanimirova, I. A Study of the Antioxidant Properties of Beers Using Electron Paramagnetic Resonance. *Food Chem.* 2013, 141.
- (3) Soares, B. M.; Pereira, E. R.; Maciel, J. V.; Vieira, A. A.; Duarte, F. A. Assessment of Dispersive Liquid-Liquid Microextraction for the Simultaneous Extraction, Preconcentration, and Derivatization of Hg²⁺ and CH₃ Hg⁺ for Further Determination by GC-MS. *J. Sep. Sci.* 2013, 36 (20), 3411-3418.
- (4) Seco, M. A.; Larruscain, E. T. F.; Silveira, J. R. K.; Picoloto, R. S.; Duarte, F. A. A Simple Approach for Fe Determination in Beer by using Dispersive Liquid-Liquid Microextraction and Flame Atomic Absorption Spectrometry. *BrJAC.* 2023 (forthcoming).

Avaliação da presença dos compostos odoríferos 2-metilisoborneol e geosmina em água de abastecimento: monitoramento e estudo de caso em Porto Alegre - RS

Nicole Haas Lazzari (PG)^{1*}, Vitor Mumbach Nilson (IC)¹, Mariana Roberto Gama Sato (PQ)¹, Tânia Mara Pizzolato (PQ)¹
*nicolehlazzari@gmail.com

¹Laboratório de Química Analítica e Ambiental (LQAA), Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Av. Bento Gonçalves, 9500, Agronomia, Porto Alegre, Rio Grande do Sul (RS)

Palavras-Chave: 2-Metilisoborneol, Geosmina, Compostos odoríferos, Monitoramento, Microextração em fase sólida, Água

Introdução

Eventos de gosto e odor de terra e mofo na água podem estar atrelados à presença de 2-metilisoborneol (2-MIB) e/ou geosmina (GSM) em corpos hídricos.¹ Estes compostos são metabólitos de cianobactérias, organismos procariontes naturalmente presentes em ecossistemas terrestres e aquáticos, principalmente na água doce, e que podem se proliferar excessivamente em determinadas condições ambientais.² A eutrofização favorece a floração das cianobactérias.² Este trabalho consiste em um estudo de monitoramento entre julho de 2022 e julho de 2023 com o intuito de avaliar a presença de 2-MIB e geosmina em amostras de água bruta e tratada coletadas em uma estação de tratamento de água (ETA) em Porto Alegre - RS, além de um estudo de caso realizado em maio de 2023 a partir de relatos de percepção de gosto e odor na água de abastecimento da mesma cidade.

Resultados e discussão

As amostras foram analisadas por microextração em fase sólida (SPME) e cromatografia a gás acoplada a espectrometria de massas (GC-MS). O modo SIM (*selected ion monitoring*) foi utilizado para as análises quantitativas. Obteve-se limites de detecção (LD) e quantificação (LQ), respectivamente, de 5 ng/L e 10 ng/L (2-MIB) e de 1 ng/L e 5 ng/L (GSM) e as curvas analíticas apresentaram boa linearidade na faixa dos LQ's a 150 ng/L.

Durante um ano a partir de julho de 2022, foram realizadas coletas mensais de água bruta e tratada na ETA São João (SJ), estação com maior incidência de casos de gosto e odor em Porto Alegre. Não houve detecção de 2-MIB nesse período; a geosmina, por sua vez, foi detectada em todas as amostras analisadas, porém abaixo de seu limite de quantificação, com exceção de outubro, quando as concentrações determinadas foram de 6,62 ng/L na água bruta e 7,02 ng/L na água tratada (Figura 1).

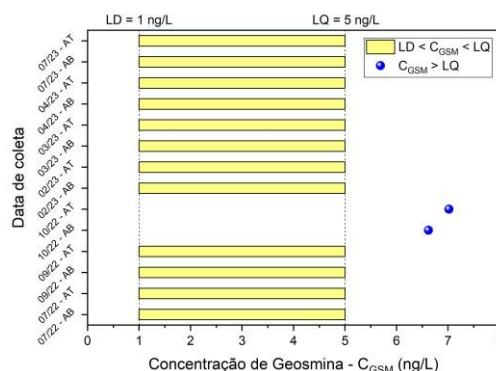


Figura 1. Concentrações de geosmina em amostras de água bruta (AB) e tratada (AT) coletadas na ETA São João.

Em maio de 2023, diversos relatos de odor e gosto em água potável foram registrados. Foram realizadas coletas em diferentes pontos de Porto Alegre, incluindo as seis ETA's que abastecem a cidade, seus pontos de captação e fozes de rios da região metropolitana. Foi detectado 2-MIB abaixo de seu LQ em água bruta da ETA SJ e no ponto de captação da ETA Francisco Lemos Pinto. As menores concentrações em que esses compostos podem ser detectados pelo olfato e paladar humanos variam na literatura a partir de 2 ng/L (2-MIB) e 4 ng/L (GSM)¹, concentrações inferiores a seus LQs e ao LD do 2-MIB, o que justifica sua não detecção mesmo durante um evento de gosto e odor.

Conclusões

O monitoramento demonstrou a frequente detecção de geosmina em água de abastecimento e a sensibilidade humana a baixas concentrações de 2-MIB.

Agradecimentos

CAPES, PPGQ-UFRGS, IQ-UFRGS e DMAE.

Referências e notas

- (1) Sessa, S.; Hoppe-jones, C.; Adams, C.; Weinrich, L. *Water Research X*, **2021**, 11, 100099.
- (2) Oh, H. S.; Lee, C. S.; Srivastava, A.; Oh, H. M.; Ahn, C. Y. *Journal of Microbiology and Biotechnology*, **2017**, 27(7), 1316.

Estudo do emprego de estrutura metal orgânica (MOF) composta por *cluster* de Zr (UiO-66) para o tratamento de águas residuais e adsorção de ácido p-arsanílico (p-ASA).

Luan F. Passos (PG)^{1*}, Vinicius P. Gil (IC)¹, Nicole P. Bins (IC)¹, Diogo P. de Moraes (PQ)¹

* luan.passos@hotmail.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Rio Grande do Sul, Brasil.

Palavras-Chave: Metal-Organic Framework, ácido p-arsanílico, UV-Vis, GFAAS.

Introdução

O arsênio (As) é um elemento potencialmente tóxico para os seres humanos e, por isso, a quantificação de As em águas residuais é frequentemente requerida.⁽¹⁾ Estudos prévios relatam a presença de As em carne e ração de aves produzidas no território nacional.⁽²⁾ A contaminação por As possivelmente está relacionada com a utilização de medicamentos veterinários para promover o ganho de peso e controlar parasitas intestinais. Nesse contexto, compostos arseno-orgânicos são eficientes no combate aos parasitas, principalmente *E. coli*. Assim, o efluente gerado em atividades agropecuárias poderá contaminar o meio ambiente, principalmente, os recursos hídricos. Os métodos atualmente conhecidos de tratamento de águas residuais possuem limitações em relação à remediação de poluentes químicos emergentes. As estruturas metais orgânicas (*Metal-Organic Frameworks*- MOFs) vêm sendo amplamente estudadas como material absorvente de compostos orgânicos e inorgânicos e possuem especial aplicação no tratamento de efluentes contaminados com o ácido p-arsanílico (p-ASA). Com isso, esse trabalho estuda o potencial de adsorção do UiO-66 para a remoção de p-ASA de águas residuais cujos principais parâmetros avaliados foram: pH, tempo de adsorção, concentração do analito e massa de adsorvente. As técnicas de espectrometria de absorção molecular UV-Vis e espectroscopia de absorção atômica com forno de grafite (GFAAS) foram utilizadas para análise quantitativa de p-ASA e As, respectivamente.

Resultados e discussão

Uma solução de 50,00 mg L⁻¹ de p-ASA foi colocada em contato com aproximadamente 2,50 mg de MOF a pH 4,00 e submetida a agitação por 90 minutos. A solução resultante foi centrifugada 2000 rpm por 15 minutos e o sobrenadante reservado para a análise quantitativa por UV-Vis e GFAAS. A concentração

remanescente de p-ASA foi determinada na sua forma molecular por UV-Vis em 252 nm. Adicionalmente, a concentração de As inorgânico foi quantificada por GFAAS. Considerando a relação estequiométrica de massa molar os resultados alcançados por UV-Vis e GFAAS são concordantes em um nível de confiança de 95% (<0,05). Nessas condições, os resultados preliminares da indicaram que o MOF possui uma eficiência de adsorção de aproximadamente 94,8 ± 2,2% para o p-ASA. Adicionalmente, não foram observadas diferenças significativas na eficiência de adsorção em pH de 4 a 8. A isoterma de Langmuir indica que a eficiência de adsorção reduz entre 10 e 15% em concentrações superiores a 75 mg L⁻¹ de p-ASA. A reprodutibilidade dos experimentos está diretamente relacionada às propriedades químicas e físicas do MOF. Pequenas alterações na configuração dos sítios ligantes alteram significativamente o potencial de adsorção e a formação das ligações coordenadas (As-O-Zr).

Conclusões

Diante os resultados apresentados, o emprego do UiO-66 foi promissor para os estudos de adsorção de p-ASA em soluções aquosas. A estabilidade do MOF em uma ampla faixa de pH não afeta significativamente a eficiência de extração, portanto amplia o escopo de aplicação para o tratamento de efluentes em pH ácido ou alcalino. O efeito de íons concomitantes em solução está em estudo, haja vista que poderá ocorrer competição entre os sítios adsorventes.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, UFRGS.

Referencias e notas

- (1) Singh, R. et al. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 2015, 112, 247-270.
- (2) Dionísio, A.G.G. et al. *Quim. Nova.* 2011, 34, 1, 49-52.

Lixiviação assistida por ultrassom para recuperação de lantânio em catalisadores exauridos de processos de craqueamento catalítico fluidizado (FCC)

Eloisa Tofolo Elicker^{1*} (IC), Klaiani Bez Fontana¹ (PG), Tatiane De Andrade Maranhão¹ (PQ), Elias Paiva F. Neto¹ (PQ), Eduardo S. Chaves¹ (PQ). *eloisatofoloelicker@gmail.com

¹Universidade Federal de Santa Catarina, Departamento de Química, Florianópolis, Santa Catarina, Brasil, 88040-900.

Palavras-Chave: Terras raras, catalisador FCC, ICP-MS, mineração urbana

Introdução

A crescente demanda por elementos terras raras (REEs) tem impulsionado pesquisas para recuperação desses elementos em fontes secundárias, principalmente, em resíduos industriais. Os catalisadores exauridos de processos de craqueamento catalítico fluidizado (FCC) contém uma quantidade relativamente grande de Lantânio (La), tornando-se uma fonte potencial deste elemento.¹ A aplicação da lixiviação assistida por ultrassom para a extração de elementos de interesse econômico em diversas matrizes vem ganhando destaque nos últimos anos. Esta técnica apresenta vantagens em relação às técnicas convencionais de lixiviação por ser relativamente simples, de baixo custo, além de estar conexa com os princípios da Química Verde.² Nesse contexto, este trabalho tem como objetivo avaliar a eficiência da extração assistida por ultrassom para a lixiviação ácida de La em catalisadores FCC, visando a posterior recuperação deste elemento.

Resultados e discussão

A concentração total de La na amostra de catalisador FCC foi determinada por espectrometria de massa com plasma indutivamente acoplado (ICP-MS), após a digestão das amostras em meio ácido assistida por micro-ondas. A concentração total de La no FCC foi de 15,93 g kg⁻¹. A otimização do processo de lixiviação ácida assistida por ultrassom foi realizada de modo univariado avaliando os parâmetros: massa de FCC (0,025 – 1,0 g), concentração de HNO₃ (0,10 – 14 mol L⁻¹), tempo de lixiviação (5 – 90 min) e temperatura (25 – 80 °C). A Figura 1 apresenta os resultados para a otimização da concentração de HNO₃. A análise estatística dos dados foi realizada por meio da análise de variância (ANOVA) e teste de Tukey, com um nível de confiança de 95%. Observa-se que as concentrações de 2 a 14 mol L⁻¹ de HNO₃ não apresentaram diferença significativa. Assim, a concentração de 2 mol L⁻¹ foi

selecionada para a lixiviação de La assistida por ultrassom.

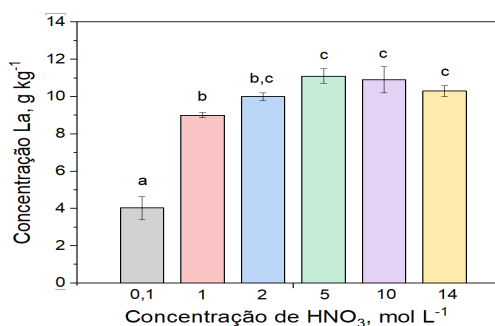


Figura 1. Efeito da concentração de HNO₃ na lixiviação assistida por ultrassom de lantânio em catalisador FCC.

Nas condições ótimas de lixiviação, 2 mL de HNO₃ 2 mol L⁻¹ foram adicionados à 150 mg de catalisador e submetidos ao ultrassom por 45 min a 80 ± 5 °C. A eficiência de lixiviação de La resultante foi de 98%. Após a lixiviação, ácido oxálico foi utilizado para a precipitação seletiva de La na forma de oxalato de lantânio obtendo-se uma recuperação de 99%.

Conclusões

A lixiviação ácida assistida por ultrassom foi eficiente para extração de La em catalisadores FCC utilizando HNO₃ diluído e proporcionando uma alta porcentagem de extração (98%).

Agradecimentos

CNPQ, LEMA, UFSC

Referências e notas

- (1) Sadeghid, S. M.; Jesus, J.; Pinto, E.; Almeida, A. A.; Soares, H. M. V. M. *Miner. Eng.* **2020**, 156, 106375. da Silva, J. F. M.; Garden, S. J.; Pinto, A. C. *J. Braz. Chem. Soc.* **2001**, 12, 273.
- (2) Tiwari, B. K. *Trends Analyt. Chem.* **2015**, 71, 100 – 109.

Nanopartículas de prata e ouro produzidas partir de extratos de *E. hiemale* e *M. glomerata*: Potencial aplicação como sensores colorimétricos para determinação de metais

Bruno Sana^{1*} (IC), Morgana L. da Rocha¹ (PG), Eduardo S. Chaves¹ (PQ)

*brunosana1502@hotmail.com

¹Universidade Federal de Santa Catarina - R. Eng. Agrônomo Andrei Cristian Ferreira, s/n - Trindade, Florianópolis - SC, 88040-900
Palavras Chave: Extrato vegetal, Síntese biológica, Prata, Ouro.

Introdução

Nanopartículas (NPs) metálicas, a base de prata (AgNP) ou de ouro (AuNP) podem ser utilizadas como sensores colorimétricos para a determinação de metais em amostras ambientais¹, alimentícias² etc. Dentre os diferentes métodos para obtenção de AgNPs e AuNPs, os biológicos, em geral, são considerados mais simples e ambientalmente amigáveis. A partir deste método, é possível obter sensores colorimétricos baseados em nanopartículas sintetizadas a partir de extratos vegetais.³ A *Equisetum hiemale* L e *Mikania glomerata*, conhecidas popularmente como Cavalinha e Guaco, respectivamente, possuem compostos fenólicos, indicando que podem produzir um extrato com capacidade antioxidante.^{4,5} Dessa forma, neste trabalho os extratos aquosos de cavalinha e guaco foram utilizados para produção de AgNP e AuNP, visando a potencial aplicação destas como sensores colorimétricos para determinação de metais.

Resultados e discussão

Os extratos aquosos foram obtidos a partir das folhas previamente secas e moídas de Cavalinha e Guaco, na proporção de 1g de folhas para 10 mL de água, sob agitação e ebulição durante 20 min. Para a síntese das AgNP e AuNP, foram preparadas quatro dispersões: AgNP e AuNP produzidas por extrato de cavalinha (EH-AgNP e EH-AuNP) e as produzidas por extrato de guaco (MG-AgNP e MG-AuNP). Para tal, foram adicionados em um béquer 5 mL de água ultra pura, 300 µL de extrato e 160 µL de NaOH (0,01 mol L⁻¹). Então, mantendo a solução sob agitação a 80 °C, foi adicionado, gota a gota, 500 µL da solução de AgNO₃ (0,01 mol L⁻¹) para AgNP e HAuCl₄ (0,01 mol L⁻¹) para AuNP, mantendo a temperatura e agitação por 30 min. O potencial Zeta das dispersões das AgNP e AuNP, obtidas com os diferentes extratos, indicaram a presença de uma carga superficial negativa, com valores entre -22,7 e -34,9 mV, sugerindo que há repulsão eletrostática entre as NPs. O índice de

polidispersão (PDI) indicou variação do diâmetro médio das NPs obtidas, onde os valores encontrados variaram entre 0,461 e 0,625. Além disso, o diâmetro hidratado, avaliado por meio do espalhamento dinâmico da luz (DLS), mostrou valores entre 19 e 47 nm, corroborando com o alto PDI das AgNP e AuNP obtidas com os diferentes extratos. Fatores como controle de temperatura de síntese e proporção entre reagentes influenciam no valor de PDI, assim, a otimização desses parâmetros é fundamental para obtenção de NPs menos polidispersas. Além disso, a sensibilidade da EH-AgNP, EH-AuNP, MG-AgNP e MG-AuNP a diferentes espécies (Al³⁺, As³⁺, Ba²⁺, Be²⁺, Cd²⁺, Ce³⁺, Co³⁺, Cu²⁺, Fe²⁺, Fe³⁺, Hg²⁺, K⁺, Mg²⁺, Mn²⁺, Mo⁶⁺, Pb²⁺, Sb³⁺, V²⁺, Zn²⁺, Cl⁻, CN⁻, F⁻, I⁻, NH₄⁺, NO₂⁻, NO₃⁻, PO₄³⁻ e S⁶⁺) foi avaliada por meio da supressão da respectiva banda de absorção. As EH-AgNP apresentaram maior sensibilidade a presença de Fe²⁺ e Fe³⁺. Assim, a aplicação das EH-AgNP como sensores colorimétricos para determinação de Fe em amostras ambientais e/ou alimentícias será avaliada.

Conclusões

A produção de AgNP e AuNP a partir do extrato de *E. hiemale* (cavalinha), e de *M. glomerata* (guaco) foi possível. Entretanto, o alto PDI indica a necessidade da otimização da síntese das NPs com ambos os extratos. A utilização das EH-AgNP como sensor colorimétrico para determinação de Fe²⁺ e Fe³⁺ mostrou-se promissor.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, UFSC e LEMA.

Referências

- (1) Kumar, K.; et al.; J of E. Chemical Engineering **2021**. 1493
- (2) Jia, X.; et al.; Sensors and Actuators B: Chemicals **2022**. 132046
- (3) Bhagat, S.; et al.; J. of Clust. Sci. **2021**. 33. 1865
- (4) Alves, C. F. S.; Msc.; UFSM.; **2015**
- (5) Carvalho, I. C.; Souza, M. F.; TCC.; FAMP., **2018**

Sensor amperométrico de glicose eletrocatalítico não enzimático baseado em eletrodo de grafite modificado com nanocompósito bimetálico rGO/NiMo(OH)₂

Mariana Booz (IC)*¹, Giancarlo Franzoi Guenther (PG)², Eduardo G. Cividini Neiva (PQ)², Daniela Brondani (PQ)¹

*e-mail: marianabooz.29@gmail.com

¹ Departamento de Ciências Exatas e Educação, Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), Campus Blumenau, Blumenau, SC.

² Departamento de Química, Universidade Regional de Blumenau (FURB), Blumenau, SC.

Palavras Chave: Sensor eletroquímico, Glicose, Nanocompósito bimetálico, Óxido de grafeno reduzido.

Introdução

A glicose é um dos analitos mais importantes em diagnóstico clínico, segurança alimentar e indústrias alimentícias¹. Eletrodos modificados com materiais compósitos à base de metais (nobres, de transição, óxidos/hidróxidos) têm sido usados com sucesso na construção de sensores de glicose não enzimáticos^{1,2}. Nanocompósitos bimetálicos entre óxido de grafeno reduzido, níquel e molibdênio (rGO/NiMo(OH)₂) vêm sendo sintetizados pelo método poliol usando etilenoglicol e adições de água. Neste trabalho foi explorado o uso desse nanocompósito como modificador de um eletrodo de grafite *labmade*. O sensor obtido foi empregado na oxidação eletrocatalítica da glicose, sendo realizados estudos de caracterização, otimização e avaliação de desempenho da metodologia proposta.

Resultados e discussão

Eletrodos de grafite (GE) foram construídos em laboratório a partir de bastões de grafite/carbono reaproveitados de pilhas descarregadas. A superfície destes eletrodos foi adequadamente polida e limpa para modificação com um filme de rGO/NiMo(OH)₂. Para isso, uma dispersão do nanocompósito em água (10 mg mL⁻¹) foi gotejada sobre o eletrodo, o solvente evaporado em dessecador e na sequência o filme foi ativado em NaOH 1,00 mol L⁻¹ empregando voltametria cíclica (VC). A etapa de ativação foi otimizada em 25 ciclos, na faixa de 0,0 a 0,6 V (vs. Ag/AgCl). A caracterização eletroquímica foi realizada por VC e espectroscopia de impedância eletroquímica (EIE). Para aplicação do sensor foram investigados diferentes analitos, sendo a glicose selecionada. Voltamogramas cíclicos registrados na ausência e na presença de glicose mostraram que o sensor proposto apresenta atividade de oxidação eletrocatalítica eficiente para este carboidrato, enquanto a oxidação da glicose não foi observada em um GE sem modificação.

As condições experimentais da análise amperométrica da glicose foram otimizadas: eletrólito suporte (NaOH 0,100 mol L⁻¹), potencial aplicado (0,40 V vs. Ag/AgCl) e intervalo das adições na cronoamperometria (25 s). Sob condições otimizadas, foram obtidas curvas de calibração com faixa linear de $1,0 \times 10^{-6}$ a $1,0 \times 10^{-3}$ mol L⁻¹ ($R^2=0,9986$), apresentando LD de $1,0 \times 10^{-6}$ mol L⁻¹. O sensor obtido (GE-rGO/NiMo(OH)₂) foi então empregado em um estudo de potenciais interferentes. Os resultados deste estudo indicaram que não houve interferência de cisteína, metionina e fenilalanina, na razão molar 1:1, [glicose]:[interferente]; e na razão 10:1 para glutathione, melatonina, paracetamol, dopamina, lactose, galactose, diclofenaco, ibuprofeno, ácido úrico e ácido ascórbico.

Conclusões

O sensor proposto (GE-rGO/NiMo(OH)₂) apresentou eficiente atividade eletrocatalítica para oxidação direta da glicose em solução alcalina, além de um bom desempenho analítico na determinação deste carboidrato, mesmo na presença de interferentes.

Agradecimentos

UFSC, FURB, FAPESC, CNPq, INCT-Nanocarbono e INCT-NanoVida.

Referências e notas

- (1) EMIR, Gamze et al. Amperometric nonenzymatic glucose biosensor based on graphite rod electrode modified by Ni-nanoparticle/polypyrrole composite. *Microchemical Journal*, v. 161, p. 105751, 2021.
- (2) SILVA, Anna E.; DE SOUZA, Victor HR; NEIVA, Eduardo GC. Crumpled graphene/Ni(OH)₂ nanocomposites applied as electrochemical sensors for glucose and persistent contaminants. *Applied Surface Science*, v. 622, p. 156967, 2023.

Método Non-Targeted na Discriminação de Méis de Abelhas Nativas

Mariana A. Xavier (IC)¹, Vitor G. Foltz (IC)¹, Victor L. R. Pinheiro (PG)¹, Renato Eising (PQ)², Cleber A. Lindino (PQ)^{1*}

¹ GIPEFEA, Universidade Estadual do Oeste do Paraná, Rua Faculdade, 645, CEP 85900-000, Toledo/PR

² GEPTec, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Rua Cristo Rei, 19, CEP 85902-490, Toledo/PR

Palavras- Chave: eletroanalítica, qualidade, quimiometria

Introdução

Méis de abelhas nativas apresentam características distintas da espécie *Apis Mellifera* e também entre si, sendo difícil padronizá-las para a comercialização e consumo. Este trabalho utilizou métodos *non-targeted* (perfil químico) visando diferenciar entre os méis de espécies de abelhas nativas para permitir, por exemplo, a determinação da origem geográfica.

Resultados e discussão

As amostras de mel foram obtidas de diferentes produtores da região e diluídas a 20% m/v em água destilada para a determinação de pH e condutividade em pHmetro de bancada MPA-210 e condutivímetro MCA-150. As amostras também foram diluídas a 10% m/v em NaOH 0,1 mol L⁻¹ para caracterização eletroquímica por meio da espectrofotometria UV-visível em espectrofotômetro Shimadzu 1800 PC usando cubetas de quartzo de caminho ótico de 1,0 cm e varredura de comprimento de onda de 200 a 1100 nm. A voltametria cíclica foi realizada na faixa de potencial de 0,0 a 0,9 V, em potenciostato Metrohm AutoLab Pgstat com eletrodo de trabalho de Cu/CuO, eletrodo de referência Ag/AgCl/KCl 3 mol L⁻¹ e contra eletrodo de aço inoxidável. Realizou-se diferentes tratamentos de dados para determinar quais variáveis demonstravam melhor distinção das propriedades dos méis e utilizou-se a ferramenta quimiométrica da Análise de Componentes Principais (PCA). A PCA foi obtida a partir dos valores de potencial de 0,2 e 0,63 V e três absorvâncias em 218, 221 e 308 nm, juntamente com área voltamétrica. A Figura 1 apresenta a voltametria cíclica de algumas amostras de méis, observado a oxidação irreversível de açúcares redutores e outros componentes, que se diferenciam dependendo da espécie da abelha nativa¹. A Figura 2 apresenta o resultado de PCA obtida para os méis de abelha nativa, as quais se apresentam bem definidas.

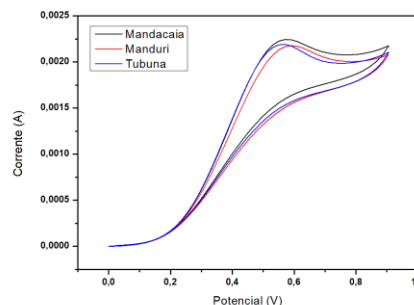


Figura 1. Voltametria cíclica das amostras de mel de abelhas nativas. – Mandacaiá; – Manduri; – Tubuna. Eletrodo de referência de Ag/AgCl/KCl 3 mol L⁻¹. Temperatura de 25,0°C.

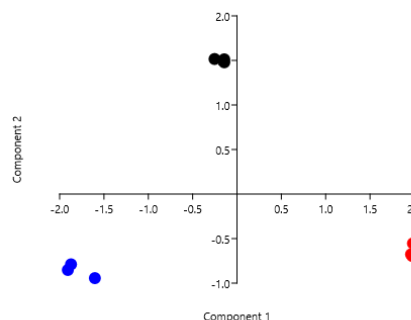


Figura 2. Score plot (autoescalado) da Análise de Componentes Principais (PCA) para distinção entre as amostras de mel. (●) Tubuna; (●) Mandacaiá; (●) Manduri.

Conclusões

O PCA permitiu diferenciar amostras de méis de abelhas nativas.

Agradecimentos

Ao PETq, à UNIOESTE e ao CNPq.

Referências e notas

(1)Barragan et al. Analytical Chemistry, 90, 3357-3365, 2018.

AVALIAÇÃO VISUAL DA MUDANÇA DE pH NO EXTRATO DE PITAYA E ANÁLISE DA LIMPEZA POR UV-VIS E NO MODO *FULL SCAN* EM GC-MS/MS

Antônio Miguel Gomes Lima* (PG), Tainá Maria Saugo (PG), Pimpernelli Jonco dos Santos (PG), Lenise Guimarães de Oliveira (PQ), Márcia Helena Scherer Kurz (PQ), Osmar Damian Prestes (PQ), Renato Zanella (PQ), Manoel Leonardo Martins (*In memoriam*) (PQ), Fábio Ferreira Gonçalves (PQ)

antoniosapgomes@gmail.com*

1. Universidade Federal do Rio Grande - FURG. Rua: Barão Cahy, 125 – Cidade Alta, Santo Antônio Da Patrulha – RS, 95500 – 000.
Palavras Chave: Pitaya; Agrotóxicos; QuEChERS; GC-MS; Preparo de Amostra.

Introdução

Os agrotóxicos são uma realidade na agricultura brasileira, sendo essenciais para equilibrar produtividade e rentabilidade¹. No entanto, seu uso indiscriminado pode acarretar sérios danos ambientais e à saúde humana, sendo crucial desenvolver métodos analíticos para quantificar esses resíduos nas diversas culturas.

A partir da aplicação do método QuEChERS original,² utilizando como sorvente Quitosana e amina primária-secundária (*primary secondary amine*, PSA), esta pesquisa objetivou examinar as mudanças de pH nos extratos de pitaya e avaliar como a etapa de limpeza afeta a remoção de coextrativos.

O ajuste de pH foi realizado nos valores de 1, 3, 5, 7, 9 e 12, nos extratos com e sem *clean up*, a fim de observar a mudança da cor dos extratos. Para o *clean up*, foi utilizado 25 mg de PSA ou 25 mg de quitosana e 150 mg de MgSO₄.

A presença de coextrativos foi avaliada também por espectrofotometria UV-Vis (200 a 800 nm) e por GC-MS/MS no modo *full scan*.

Resultados e discussão

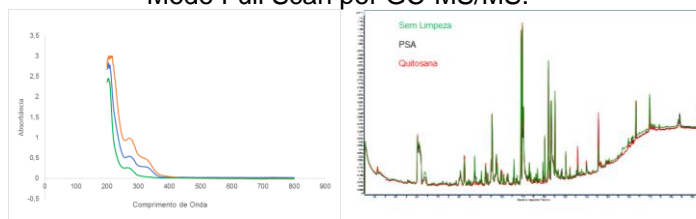
Nas análises visuais, percebeu-se que a partir do pH 6, sem a etapa de *clean up*, ocorre a precipitação de coextrativos. Já em pH 5, não ocorre precipitação, no entanto, a coloração fica amarelada.

Após a etapa de *clean up* com PSA, observou-se uma leve coloração amarelada em pH 5, já com a quitosana não se observa mais coloração alguma. Também não se observa a formação de precipitados estando com o pH > 5.

Na Figura 1, estão ilustrados os espectros UV-Vis, onde observa-se maior absorção de luz no extrato que passou pelo *clean up* com quitosana comparado ao PSA. Contudo, isso ocorre apenas na região UV já que no visível não se observa qualquer absorção. No cromatograma, estão comparados os extratos após a

etapa de limpeza com PSA e quitosana com o extrato sem limpeza. Ambos os extratos mostraram níveis semelhantes de coextrativos,

Figura 1: Comparação dos extratos sem *Clean up* (vermelho) e após *Clean up* com quitosana (azul) e PSA (verde) e Avaliação da Limpeza do Extrato em Modo Full Scan por GC-MS/MS.



Fonte: os autores

Conclusões

A etapa de limpeza mostrou-se crucial para o desenvolvimento da metodologia para determinação de resíduos de agrotóxicos na pitaya, uma vez que a mesma possui coextrativos que podem vir a atrapalhar a análise.

Agradecimentos

PPGQTA, CAPES e FURG.

Referências e notas

- (1) FAO. **The future of food and agriculture – Alternative pathways to 2050 (Summary version)** | Global Perspectives Studies | Food and Agriculture Organization of the United Nations.
- (2) ANASTASSIADES, Michelangelo et al. **Fast and easy multiresidue method employing acetonitrile extraction/partitioning and “dispersive solid-phase extraction” for the determination of pesticide residues in produce.** Journal of AOAC international, v. 86, n. 2, p. 412-431, 2003.

Efeito do pH na sorção de Zn em água utilizando hidrogéis de pectina

Rizia Maria Raimondi^{1*} (PG), Rafaela Barboza Torres¹ (PG), Alexandre Tadeu Paulino^{1,2*} (PQ)

¹Programa de Pós-Graduação em Química Aplicada, Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville, SC, Brasil

²Departamento de Química, Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville, SC, Brasil

Emails: *alexandre.paulino@udesc.br; *mariarizia97@gmail.com

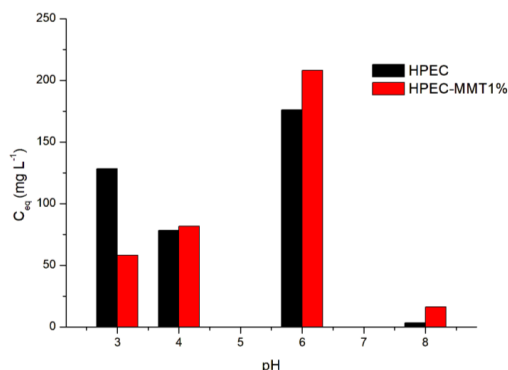
Palavras-Chave: pH, sorção, Água, Hidrogel, Pectina

Introdução

Atualmente, um dos problemas que mais influenciam a preservação do meio ambiente é a poluição química, de natureza orgânica ou inorgânica, por meio de despejos residenciais e industriais inadequados e sem tratamento apropriado (1). Metais são potencialmente tóxicos para grande parte das plantas e animais mesmo em concentrações baixas, além de serem persistentes no meio ambiente (2). Por isso, não podem estar presentes nesses tipos de resíduos. Alguns métodos físico-químicos podem ser utilizados para a remoção de poluentes de águas e efluentes, dentre eles a sorção em hidrogéis, que pode tornar um método barato e viável dependendo da origem e custo do adsorvente (3).

Resultados e discussão

As capacidades de sorção de zinco (Zn), com variação do pH, foram determinadas para estudos com o hidrogel de pectina (HPEC) e hidrogel de pectina



modificado com 1% de montmorilonita (HPEC-MMT 1%), conforme apresentadas na Figura 1.

Figura 1. Capacidades de sorção de zinco (Zn) em HPEC e HPEC-MMT1% variando o pH da solução.

Os hidrogéis permaneceram por um tempo de contato de 24h com as soluções aquosas contendo Zn, e em temperatura ambiente. Observando os resultados, é possível notar a sorção do metal em valores de pH 3 e 4. Porém, as melhores capacidades de sorção foram obtidas em soluções com valor de pH 6,3. Em pH 8,0 nota-se uma diminuição na sorção, principalmente para o zinco, devido a possível precipitação do metal como hidróxido. Ainda, é possível notar que HPEC-MMT1% é mais viável para a sorção de metais devido a sorção tanto na rede do hidrogel quanto na estrutura de montmorilonita presente na rede do material final, aumentando sua capacidade de sorção.

Conclusões

O melhor resultado para a sorção de Zn nos hidrogéis de pectina foi obtido com pH da solução aproximadamente 6,0. Quando se utiliza soluções com baixos valores de pH ocorre um aumento na concentração de íons H⁺ livres no meio, competindo com os íons Zn pelos sítios ativos no material adsorvente. Já o efeito principal quando estuda-se a sorção em pH 8,0 é a precipitação do metal como hidróxido.

Agradecimentos

CNPq (Processo: 313064/2022-9), FAPESC (Termo de outorga 2023/TR331), CAPES (Finance code 001)

Referencias e notas

- (1) Fellenberg, G. **1980**, Ed. Pedagógica e Universitária Ltda: São Paulo.
- (2) Salomons, W; Forstern, U. **1984**, Germany: Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- (3) Singh, B.; Sharma, N.; Chauhan, N. Carbohydr. Polym. **2007**, 631.

Termodinâmica de sorção de Rodamina B em biocarvão de casca de arroz

Mirlene Pereira Vitorino^{1*}(PG), Sedami Tozoun Romain Agassin^{1*}(PG), Alexandre Tadeu Paulino^{1,2+} (PQ)

¹Programa de Pós – Graduação em Química Aplicada, Universidade do Estado de Santa Catarina, Rua Paulo Malschitzki, 200, Zona Industrial Norte, 89219-710, Joinville, SC, Brasil

²Departamento de Química, Universidade do Estado de Santa Catarina, Rua Paulo Malschitzki, 200, Zona Industrial Norte, 89219-710, Joinville, SC, Brasil

Email: *mirlene.vitorino19@gmail.com; *romainagassin@gmail.com; *alexandre.paulino@udesc.br¹

Palavras-Chave: Termodinâmica, Sorção, Rodamina B, Casca de Arroz, Biocarvão

Introdução

Os corantes sintéticos são muito utilizados pela indústria em diferentes aplicações, no entanto, devido às pequenas parcelas de fixação ao longo do processamento, a maior parte deles são descartados no meio ambiente sem um tratamento adequado. Dentre diferentes técnicas para a remoção de corantes de meios aquosos, a sorção possui muitas vantagens, sendo elas, a facilidade de execução, baixo custo e elevada eficiência (1). Com isso, o estudo da termodinâmica contribui na compreensão das diferenças no processo de sorção, na melhoria de parâmetros e na comparação de sistemas adsorventes em condições experimentais. Portanto, a utilização do biocarvão de casca de arroz apontou resultados eficazes na sorção e remoção da RB em água, avaliados por estudos da termodinâmica de sorção.

Resultados e discussão

A partir desse estudo preliminar de sorção de RB no biocarvão de casca de arroz, foi possível observar que à medida que a temperatura aumenta, a capacidade de sorção diminui. Tal fenômeno pode ser explicado pelos parâmetros termodinâmicos como: variação da energia livre de Gibbs (ΔG^0_{ads}), variação da entalpia (ΔH^0_{ads}) e variação da entropia (ΔS^0_{ads}).

Tabela 1 – Parâmetros termodinâmicos para a sorção da RB utilizando carvão derivado de casca de arroz.

Temperatura (K)	Parâmetros			
	ΔG^0_{ads} (J mol ⁻¹)	ΔH^0_{ads} (J mol ⁻¹)	ΔS^0_{ads} (J mol ⁻¹)	R ²
295,15	-6069,38	- 6019,03	0,17	0,98
318,15	-6073,31			
328,15	-6075,01			
333,15	-6075,87			

Pelos estudos termodinâmicos foi possível perceber que a sorção da RB é espontânea, porque $\Delta G^0_{ads} < 0$. A

variação da entalpia obtida no presente estudo ($\Delta H^0_{ads} = - 6019,03 \text{ J mol}^{-1}$) indica que a sorção da RB utilizando biocarvão de casca de arroz é de natureza física, além disso, a sorção foi realizada em um sistema aberto indicando que houve possivelmente troca de energia entre o sistema e a vizinhança. A variação da Entropia foi positiva, sendo que este parâmetro é uma função de estado e depende muito da temperatura. Mesmo com valor positivo de entropia no processo de sorção, que apresenta variação de Energia de Gibbs negativa, há indicativo de que o adsorvato possui grande afinidade pelo adsorvente (2).

Conclusões

Ao analisar os valores da variação da Energia Livre de Gibbs (ΔG^0_{ads}) foi possível observar que o processo de sorção da RB utilizando biocarvão de casca de arroz foi espontâneo e favorável ($\Delta G^0_{ads} < 0$), para todas as temperaturas de estudos. Assim, a Energia de Gibbs aumenta com o acréscimo da temperatura do sistema. A partir da variação da entalpia foi possível concluir que o processo é exotérmico e a remoção da RB ocorre por interações físicas (fisissorção).

Agradecimentos

CNPq (Process: 313064/2022-9), FAPESC (Grant Number: 2023/TR331), CAPES (Finance code 001)

Referências e notas

- (1) Gonçalves, J.O.; Dotto, G.L.; Pinto, L.A.A. J. Mol Liquid. **2015**, 211, 430.
- (2) Nascimento, R. F.; Lima, A. C. A.; Vidal, C. B.; Melo, D. Q.; Raulino, G. S. C. Imprensa Universitária, **2014**.

Avaliação e Comparação Quantitativa de Propriedades Bioativas em Amostras de Microgreens e Vegetais Crescidos

Yasmin R. Bloedorn (PG)^{1*}, Daisa H. Bonemann (PG)¹, Charlie G. Gomes (PG)¹, Sabrina H. Scherdien (PG)¹, Adriane M. Nunes (PQ)¹, Wiliam Boschetti (PQ)¹ e Anderson S. Ribeiro (PQ)¹¹ Universidade Federal de Pelotas - Campus Capão do Leão, Capão do Leão, RS, Brasil.

* yasminbloedorn@gmail.com

Palavras-Chave: Compostos Bioativos, Microgreens, Vegetais, Atividade Antioxidante e Compostos Fenólicos.

Introdução

O interesse por novos alimentos funcionais vem se destacando, impulsionados pela crescente busca da sociedade em uma alimentação saudável. Neste contexto, os microgreens são considerados vegetais nutritivos devido ao seu alto teor de minerais e a presença de compostos bioativos em sua composição. O interesse foi despertado a partir dos resultados de Xiao *et al.* (2012), indicando que estes podem apresentar concentrações maiores de minerais, bem como em relação a algumas propriedades bioativas como compostos fenólicos e atividade antioxidante comparados aos vegetais crescidos¹. Com isso, fica evidente a importância do estudo destas propriedades neste tipo amostra, visando o conhecimento da composição bioativa desses alimentos e assim obter a comparação com seus correspondentes crescidos.

Resultados e discussão

Para a quantificação do teor total de compostos fenólicos foi utilizado o método de Folin-Ciocalteu. A reação ocorre à medida que os polifenóis reagem com o Folin para ocorrer à formação de um complexo azul que pode ser quantificado por luz visível. Os resultados estão dispostos na Figura 1.

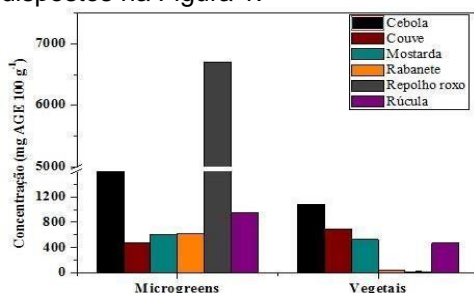
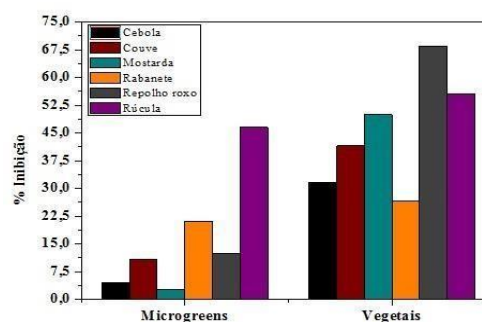


Figura 1. Concentração de compostos fenólicos em microgreens e vegetais crescidos.

A partir dos resultados observados, os microgreens destacam-se com maiores concentrações de compostos fenólicos, quando comparados aos vegetais crescidos, conforme o comportamento descrito na literatura por Xiao *et al.*, (2012). Exceto a amostra de couve mostrou um comportamento inverso. Já a atividade antioxidante, foi estimada a partir da

metodologia de Brand-Williams, que consiste na eliminação do radical DPPH• passando para sua forma reduzida, assim é possível observar a alteração de sua coloração na reação. Foram observados que os vegetais crescidos apresentam maiores concentrações em uma faixa de 114 a 298 μM TEAC g^{-1} . Estes resultados são expressos em % de inibição deste radical. Os resultados estão apresentados na Figura 2.

Figura 2. Porcentagem de inibição nas amostras de



microgreens e seus correspondentes crescidos.

Desta forma, temos que quanto menor capacidade de inibição do radical maior será a sua atividade antioxidante presente nas amostras, e com isso, pode ser visto que os microgreens apresentam maior capacidade antioxidante.

Conclusões

Assim, a quantificação dos compostos bioativos apresentou elevadas quantidades presentes na matriz do vegetal, em sua maioria nos microgreens conforme a literatura. Algumas amostras podem apresentar variações entre as maturações, o que resulta de alguns fatores agrônômicos no momento do seu cultivo fazendo com que o vegetal possa ter sofrido um estresse oxidativo em suas células absorvendo menor quantidade de nutrientes.

Agradecimentos

CAPES, CNPq e INCTAA

Referencias

- (1) XIAO, Z.; LESTER, G. E.; LUO, Y.; WANG, Q. Journal of Agricultural and Food Chemistry, v. 60, p. 7644-7651, 2012.
- (2) KOWITCHAROEN, L.; PHORNVILLAY, S.; LEKHAM, P.; PONGPRASERT, N. Applied Sciences, v. 11, N. 17, p. 7891, 2021.

Determinação voltamétrica de 17- β -estradiol utilizando eletrodo de carbono impresso de baixo custo modificado com *quantum dots* de grafeno

Juliana Costa Rolim*¹ (PG), Bruno Campus Janegitz² (PQ), Roberto de Matos¹ (PQ) Roberta A. Medeiros¹ (PQ)*

*Juliana.costa.rolim@gmail.com

¹ Departamento de Química, Centro de Ciências Exatas, Universidade Estadual de Londrina, 86057-970, Londrina PR, Brasil,

² Departamento de Ciências da Natureza, Matemática e Educação, Universidade Federal de São Carlos, 13600- 970, Araras, SP, Brasil

Palavras Chave: 17- β -estradiol, QDGs, SPE, eletrodo de carbono, baixo custo.

Introdução

O 17 β -estradiol (E2) é um dos principais estrogênios naturais responsável pelas características sexuais femininas e pela reprodução. Em altas concentrações pode alterar o sistema endócrino, afetando o crescimento, reprodução e o desenvolvimento dos seres humanos e animais¹.

O desenvolvimento de sensores descartáveis vem ganhando espaço na comunidade científica, devido as vantagens, como produção em larga escala, baixo custo relativo e a eliminação da necessidade de regeneração superficial, o que supera o problema de envenamento superficial, assim a técnica de serigrafia (SPEs) tem sido bastante utilizada na produção de eletrodos².

Os quantum dots de grafeno (QDGs) consiste em fragmentos de grafeno com dimensões apresentadas na ordem de nanômetros, capazes de produzir efeitos quânticos³.

Assim, o objetivo deste trabalho foi utilizar os SPEs, modificados com QDGs obtidos por diferentes rotas de síntese e avaliar a performance de cada um para a detecção e determinação do hormônio E2.

Resultados e discussão

Os SPEs foram construídos utilizando tinta condutora obtida pela mistura de esmalte e grafite. Os QDGs foram obtidos por diferentes rotas de sínteses, duas rotas foram por pirólise, uma utilizando apenas o ácido cítrico e a outra com glicina e etilenoglicol. A terceira rota de síntese foi realizada por microondas utilizando ácido cítrico como reagente e a quarta síntese foi feita pelo método hidrotermal, utilizando o ácido cítrico. Para avaliar a formação dos QDGs foram utilizadas as técnicas de fluorescência, UV-Vis e também foram obtidas fotografias em luz negra. Ao incidir a luz negra nos QDGs observou-se a fluorescência na cor verde, indicando a emissão de em um comprimento de onda máximo de 460 nm, que é a faixa de radiação eletromagnética visível entre as cores azul e verde, com as técnicas de UV-vis e fluorescência também foi possível observar um pico em aproximadamente 340nm, confirmando assim a formação dos QDGs. As

suspensões de QDGs foram preparadas com o polieletrólito dodecil-dihidrogenofosfato (DHP) e água, a modificação dos SPEs foi realizada com o gotejamento das respectivas suspensões em sua superfície. Em seguida, foi realizado um estudo para avaliar a detecção do par redox Fe[CN₆]^{3+/4+} e do E2, utilizando a voltametria cíclica (VC) com o SPE sem modificação e modificados com as suspensões de QDGs, observou-se que com os QDGs obtidos por pirólise do AC obteve-se uma maior intensidade de corrente de pico. Sendo assim, o QDGs sintetizado via pirólise do AC foi selecionado para o desenvolvimento do método eletroanalítico para a quantificação do E2. A curva analítica foi construída utilizando a técnica voltamétrica de pulso diferencial na faixa de concentração de 0,01 a 0,8 $\mu\text{mol L}^{-1}$ para o E2. O método proposto apresentou boa precisão nos estudos de repetibilidade intra- e entre-dias.

Conclusões

Os QDGs foram sintetizados por quatro diferentes rotas, a caracterização química mostrou que houve a formação de QDGs. De acordo com os estudos voltamétricos realizados o SPE modificado com os QDGs obtidos por pirólise do AC foram os que apresentaram maior intensidade de corrente de pico, indicando melhor interação com o E2. O método eletroanalítico proposto, se mostrou simples, de fácil execução, e apresenta como principais vantagens a miniaturização, portabilidade e baixo consumo de reagentes.

Agradecimentos

Universidade Estadual de Londrina, CNPq (307505/2021-9), Fundação Araucária (243/2022-PBA) e CAPES.

Referencias

- (1) HAO, G.; ZHENG, D.; GAN, T.; HU, C.; HU, S. v 6:1, 3 - 28, (2011)
- (2) I.A DE ARAUJO ANDREOTTI.; L.O ORZARI.; J. R CAMARGO.; R.C FARIA.; L.H MARCOLINO-JUNIOR.; M.F BERGAMINI.; A. GATTI.; B. C JANEGITZ. 840 (2019) 109-116.
- (3) GEVAERD, AVA; BANKS, CRAIG E.; BERGAMINI, MARCIO F.; MARCOLINO-JUNIOR, LUIZ HUMBERTO. 31 (2019) 843.

VOLTAMETRIA DE MICROPARTÍCULAS IMOBILIZADAS APLICADA A DETECÇÃO ELETROQUÍMICA DE FÁRMACOS

Ana Paula de O. L. Inacio(PG)^{1*}, Flávio R. Sokal(PG)¹, Géssica D. da Silveira(PQ)², Daiane Dias (PQ)¹

*anapauloliveira1814@gmail.com

¹Universidade Federal do Rio Grande, Escola de Química e Alimentos, Rio Grande, Rio Grande do Sul, Brazil, 96203-900²Chimie ParisTech – PSL, Paris, França, Cedex 05

Palavras-chave: Voltametria de Micropartículas Imobilizadas, Fármacos, Eletroquímica, Screening, Estado sólido.

Introdução

A falsificação de fármacos é uma prática antiga motivada pela obtenção de lucros (1). Uma vez que esses fármacos, quando falsificados, virão a apresentar diferentes propriedades e composição química, é proposto nesse estudo, o desenvolvimento de um método de detecção eletroquímica simples, barato e rápido (2) para o *screening* de amostras de formulação farmacêutica utilizando a voltametria de micropartículas imobilizadas (VIMP).

Resultados e discussão (3)

Para os resultados, os padrões em estado sólido de cafeína, lidocaína, procaína, fenacetina e benzocaína foram imobilizados na superfície de uma barra de grafite (grafite de lapiseira) por abrasão. O perfil eletroquímico de cada composto foi traçado por voltametria de onda quadrada (SWV) frente aos eletrólitos tampão acetato (pH 5,0), NaCl, HCl e H₂SO₄ 0,1 mol L⁻¹.

Constatou-se que dentre os eletrólitos estudados, o tampão acetato foi o que possibilitou a detecção de todos os padrões dos fármacos em um único sentido de varredura (Figura 1).

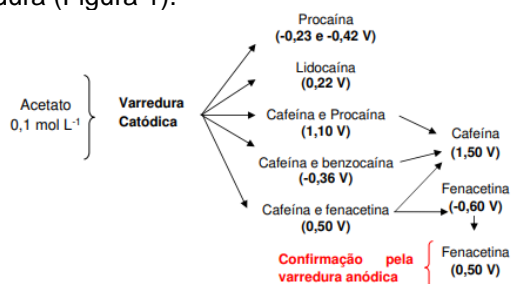


Figura 1. Dendrograma do critério de diagnóstico para o *screening* eletroquímico em estado sólido dos fármacos por SWV frente ao tampão acetato 0,1 mol L⁻¹ pH 5,0.

Além disso, o método possibilitou a detecção de dois fármacos (procaína e lidocaína) de maneira direta, ou seja, através de picos específicos dos compostos.

Para comparação da funcionalidade do método proposto, foram realizadas a análise de amostras comerciais manipuladas sob condições do eletrólito tampão acetato. Dos compostos, a cafeína e fenacetina puderam ser identificadas nas amostras através de picos bem definidos. A procaína foi identificada em todas as amostras e a lidocaína não identificada apenas quando misturada com a fenacetina. Entretanto, o estudo revelou que quando misturada com os outros fármacos em estudo, a benzocaína não é identificável.

Conclusões

A partir da análise dos dados experimentais obtidos, é possível concluir que o método proposto em eletrólito tampão acetato 0,1 mol L⁻¹ (pH 5,0) possibilitou a detecção de todos os padrões estudados. Ademais, com exceção da benzocaína, todos os fármacos foram identificados em amostra de medicamentos contendo uma mistura dos mesmos.

Agradecimentos

Agradecimentos à FURG, EQA e CAPES.

Referencias e notas

- (1) OMS. Sistema Mundial de Vigilância e Monitorização da OMS para os produtos médicos de qualidade inferior e falsificados [WHO Global Surveillance and Monitoring System for substandard and falsified medical products]. Licença: C ed. Ginebra: {s.n}.
- (2) Scholz, F.; Schröder, U.; Gulaboski, R. *Electrochem. Immob. Part. Droplets*. Springer: Berlin, 2015.
- (3) Sokal, F. R.; Aquino, S.; Silveira, G. D.; Oreste, E. Q.; Dias, D. Determinação de fármacos a partir da voltametria de micropartículas imobilizadas. BR1020220061874, INPI, 31 de mar. de 2022, Brasil.

AValiação POLIMóRFICA POR INFRAVERMELHO DO CLORIDRATO DE BUSPIRONA

Jéssika Adriane Janning¹(PG)*, Leticia Pezenti²(PG), Renato Eising¹(PQ). jessikajanning@hotmail.com

¹Universidade Tecnológica Federal do Paraná. ²UNIOESTE.

Palavras-Chave: Polimorfismo; Cloridrato de Buspirona; Caracterização.

Introdução

O termo polimorfismo é originado das palavras “muitas” e “formas” e pode ser definido como a capacidade da mesma substância existir em dois arranjos moleculares ou estruturas cristalinas diferentes, apresentando propriedades físicas distintas como solubilidade, estabilidade química, ponto de fusão e densidade ⁽¹⁾⁽²⁾.

O presente trabalho objetivou-se em avaliar o polimorfismo de amostras de IFA comerciais de cloridrato de buspirona utilizando a técnica de Espectroscopia de Infravermelho (FT-IR).

Resultados e discussão

As amostras de IFA avaliadas no estudo foram adquiridas de fornecedores localizados na Índia (Fornecedor A) e Finlândia (Fornecedor B) e as análises de FT-IR foram realizadas em espectrômetro modelo Spectrum da Perkin-Elmer com o Universal ATR (*Attenuated Total Reflection Sampling Accessory*), com resolução de 2 cm⁻¹, com 16 varreduras por espectro na região entre 4000 e 650 cm⁻¹ ⁽³⁾.

Com a finalidade de avaliar estabilidade pela influência da temperatura e umidade (UR), as amostras foram submetidas à temperatura de 50 °C e 75% de UR por 48 dias, tanto em frasco aberto quanto do fechado, em seguida realizou-se a análise de FT-IR comparando-as com o estado inicial ⁽³⁾.

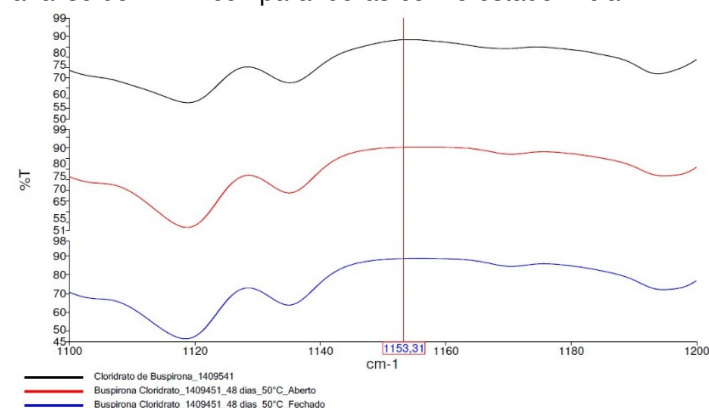


Figura 1. Espectros de FT-IR de cloridrato de buspirona do Fornecedor A antes (preto) e após estresse - frasco aberto (vermelho) e fechado (azul).

Observa-se nos espectros do Fornecedor A todas as bandas vibracionais são características da molécula na Forma 1, e ausência da banda característica da Forma 2 em cerca de 1153cm⁻¹.

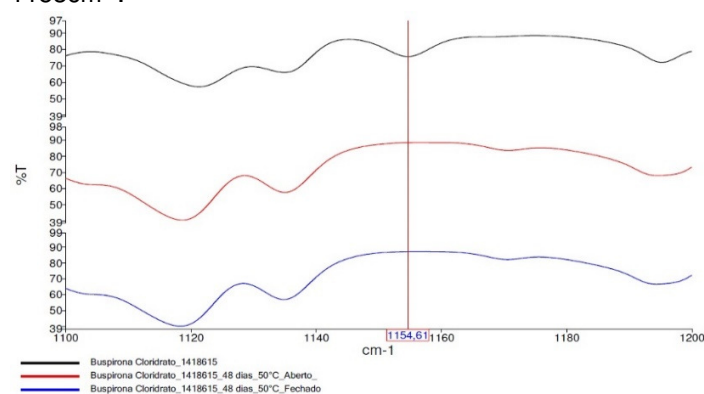


Figura 2. Espectros de FT-IR de cloridrato de buspirona do Fornecedor B antes (preto) e após estresse - frasco aberto (vermelho) e fechado (azul).

Já para o Fornecedor B pode-se verificar que a banda vibracional característica da Forma 2 em 1153 cm⁻¹ presente na amostra inicial desaparece após estresse, mostrando conversão da Forma 2 para a Forma 1.

Conclusões

Após a avaliação de matérias-primas comerciais, foi confirmado que podem existir as duas formas polimórficas comercialmente, sendo que a Forma 1 é mais estável quando em comparação com a Forma 2.

Agradecimentos

A UTFPR, ao PPGBio, a Unioeste, a Prati-Donaduzzi e Biopark.

Referências e notas

- (1) Gonzaga, e. V. Formas sólidas dos ingredientes farmacêuticos ativos (ifa) doxazosina e fluconazol e seu impacto em propriedades farmacêuticas. Universidade Federal de Alfenas, **2019**.
- (2) Hilfiker, R. Polymorphism in the Pharmaceutical Industry. 1. ed. Germany: **2006**.
- (3) Sheikhzadeh, M. et al. Solid-state characterization of buspirone hydrochloride polymorphs. *Pharmaceutical Research*, v. 23, n. 5, p. 1043–1050, **2006**.

Uma breve revisão da análise de material particulado e dissolvido de ^{224}Ra e ^{226}Ra por técnicas radioanalíticas indiretas

Alessandra Gomes da Costa^{*1} (PG), Cacinele Mariana da Rocha² (PQ), Carlos F. F. de Andrade¹(PQ)

ale_gcosta@hotmail.com

¹Universidade Federal de Rio Grande - Campus Carreiros – Avenida Itália, Km 08, CEP 96201-900, Rio Grande, RS, Brasil.

² Universidade Federal do Rio Grande do Sul – Ceclimar/CLN – Avenida Tramandaí, 976, Centro, CEP 95625-000, Imbé, RS, Brasil.

Palavras Chave: rádio, material, particulado, dissolvido, RaDeCC, RAD-7.

Introdução

Os isótopos naturais de rádio (^{223}Ra , ^{224}Ra , ^{226}Ra e ^{228}Ra) por apresentarem variedade nos tempos de meia vida ($t_{1/2}$) viabiliza sua aplicação no estudo de processos ambientais, tais como, datação, fluxo de água subterrânea e idade aparente de massas de água¹. No entanto, o estudo da fração particulada e dissolvida destes elementos é de interesse à comunidade científica devido à troca sedimento/coluna d'água e dinâmica de partículas². Desta forma, no presente trabalho, realizou-se uma revisão da literatura na plataforma da Editora Elsevier entre os anos 2001 e 2021, buscando avaliar desde o princípio das otimizações nas técnicas radioanalíticas indiretas, Sistema Contador de Coincidências Atrasadas de rádio (RaDeCC)³ e emanador de radônio (RAD-7)⁴, para análises de ^{224}Ra e ^{226}Ra , o que vem sendo desenvolvido em escala mundial.

Resultados e discussão

Na figura 1, observa-se os resultados obtidos para o quantitativo de trabalhos selecionados a partir da aplicação das palavras-chave dissolvido, particulado, RaDeCC, RaD-7 e isótopos de Ra.

Notou-se que não foi reportado na literatura a análise de material particulado pelas técnicas RaDeCC e RAD-7. Porém, para análise do material dissolvido alguns trabalhos mencionam uma prévia filtração do material particulado em filtro para posterior quantificação por espectrometria gama, sendo esta uma técnica de custo elevado, destrutiva e não portátil quando comparada às técnicas mencionadas.

Para os trabalhos reportados com análise da fração dissolvida, verificaram-se trabalhos comparativos entre as técnicas RaDeCC e RAD-7 para ambos os isótopos, não havendo diferença significativa entre as

quantificações e incertezas menores que 10 %, assim como determinadas por espectrometria gama.

Observou-se, que a utilização mais convencional é da expressão "fração total" (material particulado e dissolvido), podendo estar inviabilizando, suprimindo ou superestimando a compreensão de processos ambientais.

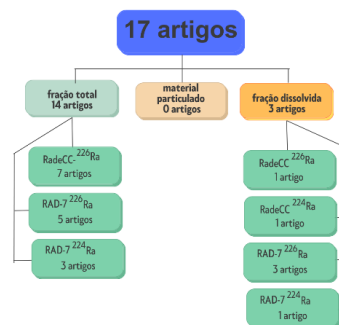


Figura 1. Esquema da revisão da literatura entre os anos 2001 e 2021.

Conclusões

Portanto, com base neste levantamento, faz-se necessário o desenvolvimento de métodos para análise de isótopos de Ra na fração particulada e dissolvida por técnicas menos dispendiosas, portáteis e conservativas.

Agradecimentos

À CAPES, CNPQ, FURG, UFRGS e ao grupo de Pesquisa do Laboratório de Hidroquímica (IO/FURG).

Referencias e notas

- (1) DULAIIOVA, H. *et al.* *Limnol. Oceanogr.* 2006, 51, 5.
- (2) PAIVA, M. L. 2018. 111 fl. Tese (Doutorado) - Curso de PPGO, Universidade Federal do Rio Grande, Rio Grande, 2018.
- (3) WASKA, H. *et al.* *J. Environ. Radioact.* 2008, 99, 12.
- (4) KIM, G. *et al.* *Environ. Sci. Technol.* 2001, 35, 23.

Determinação de Na, K, Ba e Pb em méis de abelhas dos gêneros *Melipona* e *Apis Mellifera* por Espectrometria de emissão óptica com plasma induzido por micro-ondas

Mariana Moreira Cunha (IC)^{a*}, Charlie Guimarães Gomes (PG)^a, Mariana Antunes Vieira (PQ)^a

^aUniversidade Federal de Pelotas, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Capão do Leão, RS.

*e-mail: cunha.mariana2003@gmail.com.

Palavras-Chave: Mel, MIP OES, Ultrassom.

Introdução

A espécie mais conhecida na produção do mel próprio para consumo é a *Apis mellifera*, também conhecida como abelha comum, africanizada. O mel produzido por esta espécie é mais adocicado. As abelhas do gênero *Melipona*, mais conhecidas como abelhas sem ferrão, são insetos nativos da fauna brasileira que têm sido, cada vez mais, alvo de estudos relacionados a caracterização de méis advindos dessas colônias, por tal possuir, em sua composição, minerais essenciais à saúde (Na, K, Ca, etc.) e potencialmente tóxicos (Ba, Pb, Cd, etc.), além de possuir características distintas do mel tradicional produzido pelas abelhas da espécie *Apis Mellifera*, como maior acidez e teor natural de leveduras.¹ Tendo em vista que a ingestão de mel pode contribuir para a absorção desses elementos pelo corpo humano, o objetivo desse trabalho é de determinar a concentração de Na, K, Ba e Pb em amostras de méis de abelhas da espécie *Apis Mellifera* e de abelhas sem ferrão, das espécies *Droriana* e *Frigibi*, pela técnica de Espectrometria de emissão óptica com plasma induzido por micro-ondas (MIP OES).

Resultados e discussão

Para análise, foram utilizados méis de abelhas do gênero *melipona*, das espécies *Droriana* (CD) e *Frigibi* (CF), e da espécie *Apis* (PC, PM e CC) oriundos da região colonial de Pelotas/RS. Para a análise das amostras por MIP OES, as mesmas foram submetidas a uma extração ácida assistida por ultrassom. O método foi previamente otimizado por planejamento fatorial, obtendo as melhores condições. Para avaliar a exatidão, foi utilizado dois métodos comparativos.^{2,3} Os valores de concentração encontrados por ambos os métodos foram comparados com o teste *t* de Student com 95 % de confiança. Os valores de desvio padrão relativo obtidos foram adequados (< 10%). As concentrações obtidas para Na, K, Ba e Pb nas diferentes espécies de méis investigadas estão apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Concentrações obtidas para Ba, Pb, Na e K para amostras de méis por MIP OES. Valores em mg kg⁻¹.

	Na	K	Ba	Pb
PC	570 ± 3	2928 ± 292	2,88 ± 0,08	2,88 ± 0,08
PM	657 ± 65	1206 ± 93	0,72 ± 0,04	2,88 ± 0,1
CC	573 ± 30	2319 ± 30	2,24 ± 0,02	2,98 ± 0,03
CF	316 ± 3	1012 ± 36	0,74 ± 0,01	2,2 ± 0,02
CD	758 ± 17	2590 ± 77	5,6 ± 0,5	2,2 ± 0,02

As maiores concentrações de Ba, Na e K foram encontradas na amostra CD. A concentração de Pb em todas as amostras ficou na média de 2,6 mg kg⁻¹. Além disso, considerando a ingestão de 25 g de mel por dia⁴, as concentrações encontradas para os elementos investigados estão abaixo do índice recomendado de ingestão diária, que são de 0,14 mg para Ba, 0,9 mg para Pb, 5000 mg para Na e 4700 mg para K.

Conclusões

Portando, conclui-se que é importante o conhecimento da composição do mel de abelhas sem e com ferrão, uma vez que se for ingerido de forma assídua, pode trazer benefícios a saúde. O consumo de mel da abelha espécie *Apis* ao invés do mel de abelhas do gênero *Melipona* tende a ser mais benéfico, uma vez que as maiores concentrações de elementos essenciais à saúde foram observadas no mel de abelhas sem ferrão. Dando continuidade ao trabalho, outros analitos estão sendo investigados e também estudos de bioacessibilidade, de modo a avaliar melhor a contribuição nutricional do mel.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, INCTAA.

- (1) Oliveira, A. Abelhas sem ferrão: mel com baixo teor de açúcar e ação antibacteriana. *Central CP*. **2018**.
- (2) Leal, S. S.; Sousa, R. E.; Lima, C. P. *Química Nova*. **2022**, 45, 531-536.
- (3) Sajtos, Z.; Herman, P. Harangi, S.; Baranyai, E. **2019**, 149, 103968.
- (4) Marelli, P. J. Mel: como consumir, escolher, conservar e saber se é puro. *UNISAÚDEMS*. **2022**.

Eletrodo de filme confeccionado a partir de biochar de soja para determinação de cafeína por voltametria.

Caroline Athaídes Miler (PG)^{1*}, Juliana Martins Dias (PG)¹, Sara Alves da Cunha (IC)¹, Tito Roberto Sant'Anna Cadaval Junior (PQ)¹, Luiz Antonio de Almeida Pinto (PQ)¹, Daiane Dias (PQ)¹.

cathaides@gmail.com

1. Universidade Federal do Rio Grande – FURG, Escola de Química e Alimentos – EQA, Laboratório de Eletroespectro Analítica - LEEA, Rio Grande/RS - 96.203-900

Palavras Chave: Eletrodo de filme, Biochar, Cafeína, Voltametria.

Introdução

A cada nova safra giram no setor da agroindústria toneladas de resíduos, tornando necessário a sua distribuição e/ou realocação ¹. Na região Sul, a soja destaca-se por ser amplamente cultivada, podendo seus resíduos serem utilizados na obtenção de novos produtos. Submetendo essa biomassa a um processo de pirólise em condições controladas de oxigênio, temperatura e tempo adequado, obtém-se o biochar (BC) um material carbonáceo com potencialidade na produção de sensores ². Dentre estes, destacam-se os eletrodos de filme quimicamente modificados (EFQM) que podem ser utilizados para determinação de analitos como a cafeína (CF) em amostras farmacêuticas e ambientais. A CF é um alcalóide popular, usada excessivamente inclusive como fármaco e atualmente tem sido determinada no meio ambiente ³. Considerando a importância dessa temática, esse trabalho propõe o desenvolvimento de um EFQM com BC de soja para determinar CF por voltametria.

Resultados e discussão

O eletrodo de carbono vítreo serviu como substrato para produção do EFQM. Na sua superfície foi imobilizado via *drop casting* diferentes dispersões contendo grafite (G), BC e alginato (ALG) podendo ser reticulado com glutaraldeído (GLU) ou epicloridrina (EPC). Em seguida os EFQM foram armazenados no dessecador *overnight* para evaporação do solvente e após empregados na determinação de CF por voltametria de pulso diferencial (DPV). Como demonstrado na figura 1, as maiores respostas de corrente da CF foram obtidas na modificação com G+BC+ALG e G+BC+ALG(EPC) obtendo-se corrente 55% maiores do que a modificação do (G+ALG). Dentre os eletrodos que apresentaram maiores respostas, o EFQM de G+BC+ALG apresentou maior estabilidade (RSD=11%).

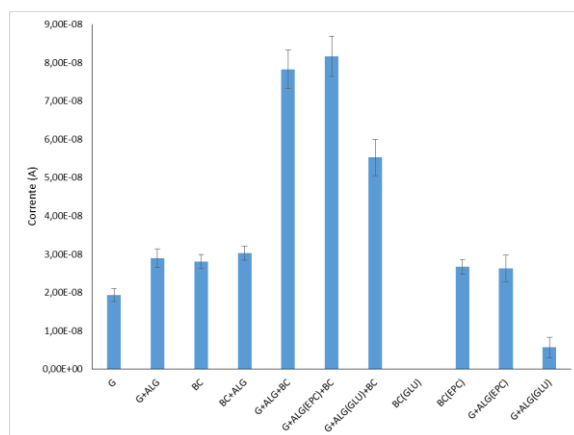


Figura 1. Avaliação das respostas de corrente da CF frente às modificações dos eletrodos.

Conclusões

Com os resultados preliminares aqui demonstrados, considera-se vantajoso utilizar o BC de soja (obtido a 300 °C por 120 minutos com aquecimento de 25°C min⁻¹) para produzir EFQMs aplicado à determinação de CF, uma vez que melhora a sensibilidade do método. Ainda pretende-se avaliar a influência do eletrólito e dos parâmetros voltamétricos na resposta de corrente da CF assim como avaliar os parâmetros de mérito (LOD, LOQ, precisão, exatidão, repetibilidade e seletividade).

Agradecimentos

FURG, PPGQA, LEEA, FAPERGS, CAPES e ao Governo do estado do RS.

Referências e notas

- (1) Siqueira, M.M., et al. (2022). Brazilian Agro-industrial Wastes as Potential Textile and Other Raw Materials: a Sustainable Approach. **Materials Circular Economy**. 9.
- (2) Silva, L. A., et al. (2020). Electrochemical devices obtained from biochar: advances in renewable and environmentally-friendly technologies applied to analytical chemistry. **Trends in Environmental Analytical Chemistry**, v. 26, p. e00089.
- (3) Tasic, Z.Z., et al. (2022). Recent Advances in Electrochemical Sensors for Caffeine Determination. **Sensors**. 22 (23). 9185.

Fracionamento de compostos fenólicos em amostras de erva-mate (*Ilex paraguariensis*) orgânica e convencional.

Juliana M Dias (PG)^{1*}, Michele M de Souza (TC)¹, Rodolfo Carapelli (PQ)¹.

martinsdiasjuliana@gmail.com

1. Universidade Federal do Rio Grande – FURG, Escola de Química e Alimentos – EQA, Laboratório de Eletroespectro Analítica - LEEA
 Palavras Chave: erva-mate (EM), compostos fenólicos (CF), compostos fenólicos livres (CFL), compostos fenólicos conjugados (CFC), sistemas de cultivo (SC) e órgãos da planta.

Introdução

A EM (ORG e CONV) são produtos obtido a partir das folhas e talos da *I. paraguariensis* sendo produtos de grande valor cultural e potencial tecnológico⁽¹⁾, a EM é rica em bioativos, como os CF que conferem características organolépticas e promovem a manutenção do balanço oxidativo as plantas⁽²⁾ sendo de grande interesse e alta aplicabilidade tecnológica⁽³⁾ por isso, o estudo de estratégias de extração dos CF como a combinação de métodos de extração com solventes orgânicos, que permite a extração de CFL, seguidos de procedimentos de hidrólise ácida, capaz de extrair CFC, são capazes de otimizar a extração, permitindo maior teor de compostos extraídos e quantificação mais condizente com a presença destes na matriz vegetal⁽⁴⁾. Com isso, o presente trabalho objetiva a avaliação da extração fracionada de CF em amostras de folhas e talos de EM ORG e EM CONV, visando maior obtenção de CF e também a compreensão da síntese de CF em diferentes órgãos da planta, frente diferentes sistemas de cultivo.

Resultados e discussão

A tabela 1 mostra os resultados obtidos no presente trabalho sendo evidente a distinção entre o teor de CF das folhas e talos, isso se deve forma como se dá a síntese metabólica nos diferentes órgãos⁽⁵⁾. O comparativo entre ORG e CONV não evidenciou claras distinções, o que pode ser resultado das dinâmicas entre as práticas adotadas no SC e o desenvolvimento da EM visto que, a síntese de CF pode ser resultado de um conjunto de fatores que não são definidos legalmente na diferenciação entre ORG e CONV, como por exemplo, exposição à radiação UV, que configura um estresse abiótico presente em ervais solteiros (apenas *I. paraguariensis*), mas não em ervais conjugados⁽⁶⁾ e são características não definidas pelo SC.

A avaliação do fracionamento evidenciou que há aumento no teor de CF uma vez que, os CFC se

encontram interagindo com outras biomoléculas no meio intracelular, com carboidratos, lipídios e outros CF⁽⁷⁾, o que os torna inacessíveis e dificulta sua extração, entretanto com a aplicação do procedimento de hidrólise ácida (CFC), após a extração com solvente orgânico (CFL), possibilita o rompimento das ligações que conjugam os CF, permitindo a sua extração e, conseqüentemente, aumentando o teor de CF⁽⁵⁾.

Tabela 1. Média dos teores de CFL e CFC em folhas e talos de erva-mate ORG e CONV.

	Folhas		Talos	
	CFL	CFC	CFL	CFC
ORG	305.8 ± 141.8	1110.0 ± 641.4	184.6 ± 80.5	435.1 ± 244.8
CONV	333.7 ± 94.1	1557.8 ± 515.4	117.6 ± 79.0	667.6 ± 179.1

Conclusões

Conclui-se com o presente trabalho que o fracionamento de CP incrementa a concentração de CP obtidos da EM que a os CFC são mais concentrados do que os CFL, que as folhas de EM são mais concentradas do que os talos e que o sistema de cultivo não parece ser um fator decisivo na síntese de CP em EM.

Agradecimentos

Agradecemos a CAPES, CNPq, FURG, EQA e ao PPGQTA.

Referencias e notas

- (1) SANTETTI, G.S. *et al. Food Sci. Technol.* **2021**, 146, 111442.
- (2) MEINHART, A.D. *et al. J. Agric. Food Chem.* **2010**, 58, 2188-2193.
- (3) ZHANG, B.; ZHANG, Y.; LI, H.; DENG, Z. e; TSAO, R. *Trends Food Sci. Technol.* **2020**, 105, 347-362
- (4) LI, W. *et al. Ind. Crops Prod.* **2020**, 147, 112250
- (5) WANG, Z., LI, S., GE, S., & LIN, S. *J. Agric. Food Chem.* **2020**, 68, 11, 3330–3343
- (6) HECK, C.I.; SCHMALKO, M. e; MEJIA, E.G. *J. Agric. Food Chem.* **2008**, 56, 18, 8394-8403
- (7) JAKOBEK, L. *Food Chem.* **2015**, 175, 556-567.

DETERMINAÇÃO DE COBRE EM ALIMENTOS INFANTIS EMPREGANDO A DISPERSÃO DA MATRIZ EM FASE SÓLIDA E HR-CS FAAS

Lisliane Kickofel (PG)*, Kaiane de Quevedo Ribeiro (PG), Maiara Helena de Melo Malinowski (PG), Ana Cláudia Beduhn Luckow (PG), Cecília Ferreira da Silva (IC), Carlos Francisco Ferreira de Andrade (PQ), Bruno Meira Soares (PQ)
lisliane.kickofel@gmail.com

Universidade Federal do Rio Grande - FURG. Av. Itália, Km 8.

Palavras Chave: Alimentos infantis, Cobre, MSPD, HR-CS FAAS

Introdução

A amamentação é a principal fonte de alimentação nos primeiros 6 meses de vida. Na ocorrência de problemas no aleitamento, deve ser avaliada a possibilidade de introdução de fórmulas infantis (FI). Existe uma preocupação quanto a composição dos nutrientes em FI como os elementos essenciais (Cu, Fe e Zn) e potencialmente tóxicos (As, Cd, Cr e Pb). A Agência Nacional de Vigilância Sanitária (ANVISA) estabelece os níveis de 35 a 120 μg de Cu/100 kcal em fórmulas infantis.¹ Para a quantificação desses elementos, destacam-se a espectrometria de absorção atômica com atomização por chama (FAAS) e forno de grafite (GF AAS), além da espectrometria de emissão óptica com plasma indutivamente acoplado (ICP OES) e espectrometria massa com plasma indutivamente acoplado (ICP-MS). A maioria destas técnicas demanda um método de preparo de amostras que seja eficiente. Entre os métodos de preparo amostras mais empregados em alimentos visando a determinação elementar destaca-se a digestão assistida por micro-ondas (MAD). No entanto, é necessário o emprego de instrumentação de custo relativamente elevado. Os métodos analíticos modernos devem atender aos princípios da Química Analítica Verde (GAC). Como alternativa, este trabalho propõe o emprego da dispersão da matriz em fase sólida (MSPD), um método de extração baseado na maceração da amostra com um suporte sólido abrasivo, seguida de uma extração sólido-líquido. A MSPD permite o uso de suportes sólidos de fontes renováveis e extração com soluções diluídas, além de ser simples, rápida e de baixo custo. Portanto, o objetivo desse trabalho foi desenvolver um método empregando a MSPD e HR-CS FAAS para a determinação de Cu em alimentos infantis.

Resultados e discussão

As determinações de Cu foram feitas em um espectrômetro de absorção atômica de alta resolução com fonte contínua (HR-CS AAS) modelo ContrAA 700

(Analytik Jena). Foram avaliados os principais parâmetros da MSPD, como o tipo de suporte sólido (alumina, areia do mar, C18, florissil, sílica, terra diatomácea e sem suporte sólido), massa de amostra (0,1; 0,15; 0,20 e 0,25 g), tipo (água ultrapura e HNO_3 diluído) e concentração de HNO_3 (0,1; 0,5; 1 e 2 mol L^{-1}) e o tempo de maceração (1, 3 e 5 min). Como método comparativo, as amostras foram submetidas a digestão assistida por micro-ondas (MAD) com quantificado por espectrometria de absorção atômica de alta resolução com fonte contínua e atomização por forno de grafite (HR-CS GF AAS). As condições otimizadas foram 0,25 g de amostra, 0,25 g de terra diatomácea (suporte sólido), 1 min de maceração, 5 mL de HNO_3 1 mol L^{-1} , agitação em vórtex por 1 min e centrifugação a 4000 rpm por 10 min. Os extratos foram filtrados por filtração simples e com filtros de seringa (0,45 μm) para posterior análise por HR-CS FAAS. O método otimizado foi aplicado em amostras de FI e foram obtidas as concentrações de 3,5; 3,7; 2,8 $\mu\text{g g}^{-1}$ para FI (0 a 6 meses), FI (6 a 12 meses), FI (1 a 3 anos), respectivamente. O método proposto também foi aplicado em amostras de leite em pó e composto lácteo mas os resultados estiveram abaixo do LD (0,35 $\mu\text{g g}^{-1}$). Na avaliação da exatidão, não houve diferença significativa ($p > 0,05$) na comparação com o método comparativo e os RSDs estiveram abaixo de 5%.

Conclusões

Foi possível desenvolver um método simples, rápido, de baixo custo, com reagentes de fontes renováveis e soluções diluídas empregando a MSPD e HR-CS FAAS para a determinação de Cu em alimentos infantis.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPERGS, FINEP, Centro Integrado de Análises (CIA/FURG) e Laboratório de Análise de Compostos Orgânicos e Metais (LACOM/FURG).

Referencias e notas

(1) ANVISA. RDC - - Nº 44. 2011.

Validação de método analítico para determinação de aflatoxina B1 e ocratoxina A em fígado animal

Juliane Lima da Silva (PG)^{1*}, Alessandra Cimbalo (PQ)², Luana Izzo (PQ)³, Jaqueline Garda-Bufferon (PQ)¹, Lara Manyes (PQ)², Alberto Ritieni (PQ). julianelima@furg.br

¹Laboratório de Micotoxinas e Ciência de Alimentos, Escola de Química e Alimentos, Universidade Federal do Rio Grande — FURG, Av Itália, km 8, Rio Grande, RS 96201-900, Brazil; ²Laboratory of Food Chemistry and Toxicology, Faculty of Pharmacy, University of Valencia, Av. Vicent Andrés Estellés s/n, Burjassot, 46100 Valencia, Spain; ³Food Lab, Department of Pharmacy, University of Naples Federico II, Via Domenico Montesano 49, 80131 Naples, Italy

Palavras Chave: micotoxinas, UHPLC-Q-Orbitrap HRMS, estudo *in vivo*, bioacumulação

Introdução

Compreender e controlar a contaminação de alimentos por micotoxinas e a exposição de seres humanos e animais a esses contaminantes é, nos dias de hoje, uma das principais pautas quando se trata de segurança alimentar. Essas toxinas, quando absorvidas no trato intestinal, chegam à corrente sanguínea e podem ser bioacumuladas nos órgãos e tecidos, ou excretadas em fluidos biológicos ou fezes¹. Entretanto, a exposição alimentar crônica a aflatoxina B₁ (AFB₁) e ocratoxina A (OTA) em todas as faixas etárias ao longo da vida pode causar danos hepáticos e renais, sendo estes, então, órgãos alvo. Dentro desse contexto, um estudo *in vivo* em camundongos será realizado, no intuito de avaliar a bioacumulação dessas micotoxinas nesses animais. Para isso, é essencial que o desenvolvimento e a validação de um método analítico para determinação dos níveis de AFB₁ e OTA nessa matriz seja realizado. Nesse contexto, o objetivo inicial desse estudo foi o desenvolvimento do método analítico em fígado de galinha utilizando QuEChERS² no preparo de amostras, e cromatografia líquida de alta eficiência acoplada à espectrometria de massa de alta resolução para quantificação.

Resultados e discussão

A validação do método foi realizada utilizando fígado de galinha como matriz branco. O método QuEChERS foi empregado no preparo de amostras, utilizando acetonitrila acidificada com ácido acético a 1% como solvente extrator. A necessidade da etapa de *clean-up* utilizando C₁₈ foi avaliada. As principais figuras de mérito analítico, como linearidade, faixa linear de trabalho, exatidão, precisão, efeito matriz e limites de detecção e quantificação foram avaliados³. Ensaios de recuperação

foram avaliados em 4 concentrações diferentes, 5, 10, 25 e 50 ng mL⁻¹, com três repetições, em três dias diferentes. Doze níveis de concentração foram utilizados para construir as curvas de calibração que mostraram boa linearidade entre LOQ e 100 vezes os níveis de concentração de LOQ. O efeito da matriz foi avaliado e calibrações correspondentes à matriz foram utilizadas para quantificação. Os limites de quantificação para AFB₁ e OTA foram, respectivamente, 0,78 e 6,25 ng mL⁻¹. As taxas de recuperação foram de, no mínimo, 70% para ambas as micotoxinas, com RSD abaixo de 20% para cada nível analisado.

Conclusões

O método foi validado, respeitando todas as figuras de mérito descritas nas agências reguladoras consultadas, e será aplicado em amostras experimentais de fígado para detectar a concentração de AFB₁ e OTA bioacumuladas nos tecidos hepáticos.

Agradecimentos

Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – CAPES – Código 001.

Referencias e notas

- (1) Sobrova, P., Adam, V., Vasatkova, A., Beklova, M., Zeman, L., Kizek, R., 2010. *Interdiscip. Toxicol.* 3.
- (2) Anastassiades, M., Lehotay, S.J., Štajnbaher, D., Schenck, F.J., 2003. *Journal of AOAC Internat.*, 86, 412–431.
- (3) SANTE, 2017. Guidance document on analytical quality control and method validation procedures for pesticide residues and analysis in food and feed.

Determinação da concentração total de Al, Ca, Cr e Na em amostras de carnes vegetal

Adryo Nobre Tavares¹; Jéssica da Rosa Porto¹, Kaiane de Quevedo Ribeiro¹, Daisa Hakbart Bonemann¹, Charlie Guimarães Gomes¹, Anderson Schwingel Ribeiro¹

¹Universidade Federal de Pelotas, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Capão do Leão, RS, Brasil, 96160-000.

*e-mail: – adryo.nobre.tavares12@gmail.com

Palavras-Chave: Carne Vegetal, Decomposição ácida, MIP OES

Introdução

A carne vegetal ganhou destaque como uma alternativa ao consumo de carne animal, pois possuem menores níveis de colesterol e maiores teores de carboidratos, além de serem fontes de minerais. Apesar dos inúmeros benefícios que trazem à saúde humana, as carnes vegetais podem conter, além de elementos essenciais, elementos potencialmente tóxicos e nocivos, portanto, monitorar a concentração de metais nos alimentos é de extrema importância nutricional e toxicológica^{1,2}. Técnicas de emissão atômica multielementar, como a Espectrometria de Emissão Óptica por Plasma Induzida por Micro-ondas (MIP OES), têm sido utilizadas para monitorar elementos em diferentes tipos de amostras, especialmente em amostras de alimentos³. Diante do exposto, o presente trabalho tem por objetivo determinar a concentração total de Al, Ca, Cr e Na em amostras de carne vegetal cozidas por MIP OES.

Resultados e discussão

Foram adquiridas amostras de carnes vegetais na forma de congelados, no comércio de Pelotas/RS. As amostras foram cozidas em forno elétrico doméstico, dentro de um recipiente de vidro a 200 °C durante 30 minutos. Para o preparo das amostras, realizou-se uma decomposição ácida onde, pesou-se 1,28 g de amostra diretamente nos tubos de decomposição, e adicionou-se 5 mL de HNO₃ 6,5 mol L⁻¹. Colocou-se sob aquecimento num bloco digestor com um sistema de refluxo durante 3 h à 134 °C. Após o resfriamento, adicionou-se 2 mL de H₂O₂ e, em seguida, as amostras retornaram ao bloco digestor por mais 1 h. Após o resfriamento, as soluções foram transferidas para frascos de polipropileno (PP) e avolumadas a 20 mL com água desionizada. Os valores da concentração total são apresentados na Tabela 1. Para o Cr, todas as amostras ficaram abaixo do limite de detecção (0,02 mg kg⁻¹). A amostra B apresentou as maiores concentrações de Al e Na, enquanto a amostra A obteve a maior concentração de Ca. A principal diferença nas concentrações entre as amostras pode ser explicada pela inclusão de aditivos para produzir textura, suculência e sabor semelhantes à carne⁴.

Tabela 1. Concentração total de Al, Ca, Cr e Na em amostras de carnes vegetais cozidas (mg/kg).

Elementos	Amostras		
	A	B	C
Al	6,63 ± 0,72	10,79 ± 0,78	2,96 ± 0,01
Ca	1.556 ± 142	777 ± 30	448 ± 49
Cr	<LD	<LD	<LD
Na	4.317 ± 93	6.939 ± 569	5.760 ± 499

média ± desvio padrão

Considerando que o valor de ingestão diária recomendada (DRI) para adultos de Al, Ca e Na é de 2 mg/peso corporal, 1000 e 5000 mg, respectivamente, e o consumo de 100 g de carne vegetal por dia, pode-se concluir que as amostras contribuem para a ingestão desses elementos sem ultrapassar os valores recomendados.

Conclusões

Os resultados forneceram informações cruciais sobre o teor de minerais em amostras de carnes vegetais, mostrando o comportamento desses analitos após a cocção. Além disso, a pesquisa sobre a presença de minerais em proteínas à base de vegetais é de grande importância para pessoas que seguem dietas sem carnes.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, INCTAA

Referências e notas

- (1) Yeo, M.T.Y.; Bi, X.; Henry, C.F. *Food and Humanity*, **2023**, 1, 670-674.
- (2) Yang, Y.; Zheng, Y.; Ma, W.; Zhang, Y.; Sun, C.; Fang, Y. *Food Hydrocolloids*, **2023**, 143, 108886.
- (3) Bonemann, D. H.; Luckow, A. C. B.; Pereira, C. C.; Souza, A. O.; Cadore, S.; Nunes, A. M.; Vieira, M. A.; Ribeiro, A. S. *J. Food Comp. Anal.*, **2021**, 96, 103716.
- (4) Ahmad, M.; Qureshi, S.; Akbar, M.H.; Siddiqui, S.; Gani, A.; Mushtaga, M.; Hassana, I.; Dhull, S. *Applied Food Research*, **2022**, 2, 100154.

Caracterização preliminar de compostos orgânicos no efluente de esgoto tratado em Pelotas-RS

Jéssica Etcheverria do Prado Hartwig¹ (PG)*, Ana Paula Stefanelo e Silva¹ (PG), Gabriele Duarte Ferreira¹ (PG), Fernanda Vasconcelos Telechi¹ (PG), Pedro José Sanches Filho¹ (PQ)

¹ Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Sul Rio-Grandense – Campus Pelotas

*jessicaetcheverriahartwig@gmail.com

Palavras chave: Efluente doméstico, compostos orgânicos Cromatografia, GC/MS.

Introdução

O crescimento populacional nos últimos anos gera o aumento da produção de efluentes domésticos. Os efluentes domésticos precisam passar por tratamento antes de serem encaminhados para seu destino final a fim de minimizar seus impactos nocivos ao meio ambiente. Para avaliar a eficiência do tratamento bem como o impacto do efluente gerado sobre o corpo receptor hídrico a caracterização química é necessária. Neste sentido métodos de extração, pré-concentração e determinações cromatográficas vem sendo utilizados. ⁽¹⁾ O presente trabalho teve como objetivo, caracterizar as principais classes químicas presentes no esgoto doméstico tratado (EGT) utilizando a extração líquido-líquido e cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massa. (GC/MS). A amostra de EGT foi coletada na saída na estação de tratamento de esgoto ETE-Fragata-Pelotas-RS. 100,0 mL desta com 10% de NaCl foram submetidos à extração líquido-líquido com diclorometano (DCM)⁽²⁾. Os extratos, secos em Na₂SO₄ anidro foram derivatizados com N-trimetilsilil-N-metiltrifluoroacetamida (MSTFA) e a seguir corrigidos a 1,0 mL e analisados por GC/MS.⁽¹⁾ Os compostos foram identificados usando-se a biblioteca NIST, considerando similaridades superiores a 80%.e índice de retenção de Van Den Dool and Kratz considerando-se variações de 20 unidades.

Resultados e discussão

Foram identificados 124 compostos com área relativa superior a 0,1%, sendo o maior número de hidrocarbonetos (35,5%). Quando observamos a constituição quantitativa (% área) verifica-se como componentes majoritários ácidos orgânicos (33,1%), destacando-se o Hexadecanóico (11,8%) e Octadecanóico (9,1%), hidrocarbonetos (23%), principalmente alcanos lineares e ramificados. Os álcoois representaram 11,3% dos compostos e 10,9% em área, destacando-se álcoois graxos como o

Octacosanol (1,6%) e o Hexacosanol (1,5%). Dentre a classe do CPPF (Compostos com Núcleo Ciclopentanoperidrofenantreno) foi encontrado compostos como Colesterol e Coprosterol considerados marcadores de esgoto sanitário. Além disso foram encontrados compostos como Octocrileno, 1-N-Fenil - Naftalenamina e Ftalatos reconhecidos como causadores de problemas ambientais.

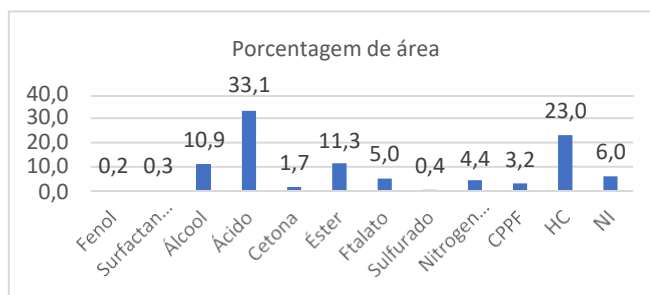


Figura 1: Principais classes químicas no EGT.

Conclusões

Através desse estudo foi possível determinar as principais classes químicas presentes no efluente de esgoto sanitário, demonstrando a persistências de alguns compostos ao processo de tratamento empregado pela ETE. Os dados podem servir como um alerta sobre o possível impacto ambiental que os mesmos podem causar. Os dados gerados podem servir para a readequação dos processos empregados pela ETE.

Agradecimentos

IFSUL Campus Pelotas-RS; FAPERGS; MECA; GPCA

Referências e notas

- (1) COLL, J. P. R.; CUNHA, M. E.; AMARAL, M. A. F. S.; PADILHA, M. C.; SILVA, G. M. G.; ARSAND, D. R.; SANCHES FILHO, P. J. Evaluation of the effect of silylation in the development of an analytical method for the determination of UV filters and hormones by GC/MS. Brazilian Journal of Analytical Chemistry - BrJAC (Print), 2023. [s.l: s.n.].
- (2) EPA. Method 1698: Steroids and Hormones in Water, Soil, Sediment, and Biosolids by HRGC/HRMS. 2007.

Uso da voltametria em estado sólido e análise de componentes principais na distinção de adulterantes encontrados em amostras de cocaína

Sabrina de A. Aquino¹ (PG)*, Alexandre de M. Machado² (TC), Cláudio M. P. de Pereira³ (PQ), Daiane Dias¹ (PQ)

*sabrine_aquino@yahoo.com.br

¹Laboratório de Eletroespectro Analítica, Universidade Federal do Rio Grande, Av. Itália, Km 8 - Rio Grande – RS

²Núcleo técnico-científico, Delegacia de Polícia Federal de Pelotas

³Laboratório de Lipidômica e Bioorgânica, Universidade Federal de Pelotas, Campus Capão do Leão – Pelotas – RS

Palavras Chave: Voltametria, PCA, Cocaína, Adulterantes

Introdução

A voltametria de micropartículas imobilizadas (VIMP) é uma técnica eletroquímica em estado sólido utilizada na triagem e controle de qualidade de produtos farmacêuticos¹ e alimentícios². Esta técnica apresenta potencial para aplicação em áreas como a forense, para discriminação de drogas e identificação de adulterações. Os adulterantes são substâncias que imitam os efeitos da droga, que são adicionadas pelos traficantes com o intuito de aumentar o lucro obtido com a venda³.

Resultados e discussão

Utilizando a VIMP em combinação com a voltametria de onda quadrada (SWV) obteve-se o perfil eletroquímico da cocaína e de cinco adulterantes comumente encontrados em amostras apreendidas (Figura 1). Todos os compostos estudados apresentaram perfil de oxidação semelhante, apresentando pico de oxidação bem definido na região positiva, a proximidade destes dificulta a distinção dos compostos utilizando apenas o potencial como critério para identificação.

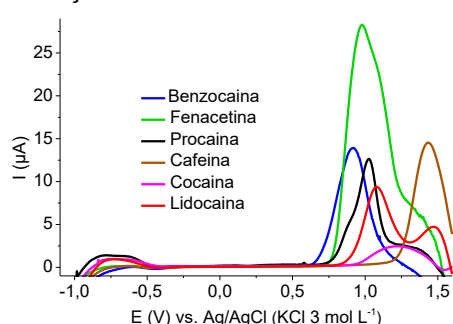


Figura 1. Voltamogramas anódicos obtidos por SWV da cocaína, benzocaina, cafeína, fenacetina, lidocaína e procaina em estado sólido utilizando tampão acetato 0,1 mol L⁻¹ pH 4,4. Condições SWV: E_{inicial}: -1 V; E_{final}: 1,6 V, E_{step}: 4 mV, frequência: 5Hz e amplitude: 25 mV. Eletrodo de trabalho: PIGE.

Entretanto empregando a análise de componentes principais (PCA) nos dados voltamétricos foi possível obter uma diferenciação satisfatória entre a cocaína e os cinco adulterantes avaliados, apesar da semelhança do perfil eletroquímico.

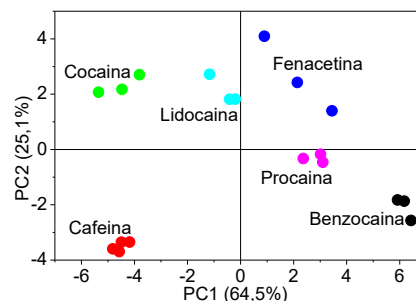


Figura 2. Gráfico de escores calculados para os dados de corrente normalizados da SWV no sentido anódico.

Conclusões

Este estudo mostra a possibilidade de utilização deste método para identificação de adulterantes em amostras de cocaína de forma simples e rápida, utilizando pequena massa de amostra e diretamente em estado sólido.

Agradecimentos

FURG, EQA, PPGQA, CAPES

Referências e notas

- (1) da Silveira, G. D.; Bressan, L. P.; Schmidt, M. E. P.; Dal Molin, T. R.; Teixeira, C. A.; Poppi, R. J.; da Silva, J. A. F.; *J. Solid State Electrochem.* **2020**, *24*, 1999.
- (2) Durigon, A. M. M.; da Silveira, G. D.; Sokal, F. R.; Pires, R. A. C. V.; Dias, D.; *J. Solid State Electrochem.* **2020**, *24*, 2907.
- (3) Magalhães, E. J.; Nascentes, C. C.; Pereira, L. S. A.; Guedes, M. L. O.; Lordeiro, R. A.; Auler, L. M. L. A.; Augusti, R.; de Queiroz, M. E. L. R.; *Sci. Justice* **2013**, *53*, 425.

Determinação multielementar de metais em suplementos alimentares empregando a análise direta por HR-CS GF AAS

Odiane C. Balieiro¹(PG), Juliana C. Da Silva¹(IC), Morgana B. Dessuy¹ (PQ)*

¹ Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves 9500, Porto Alegre, Brasil

Palavras Chave: Suplementos alimentares, Cd, Cr, Fe, HR-CS GF AAS

Introdução

Suplementos alimentares são produtos para ingestão oral, apresentados em formas farmacêuticas, destinados a suplementar a alimentação de indivíduos saudáveis com nutrientes, substâncias bioativas, enzimas ou probióticos¹. Essas substâncias têm sido cada vez mais consumidas pela população e, somente em 2018, a Agência Nacional de Vigilância Sanitária (ANVISA) estabeleceu uma Resolução que estabelece os requisitos sanitários dos suplementos, incluindo os limites mínimos e máximos de diferentes metais. Assim, o objetivo desse trabalho foi desenvolver um método analítico para a determinação sequencial e simultânea de Cd, Cr e Fe em suplementos alimentares por espectrometria de absorção atômica de alta resolução com fonte contínua e forno de grafite (HR-CS GF AAS) com análise direta de sólidos.

Resultados e discussão

Para o estudo foi utilizado um espectrômetro de absorção atômica de alta resolução com fonte contínua, modelo contrAA 700 (Analytik Jena AG). Foram usadas a linha principal do Cd (228,802 nm) e do Cr (357,869 nm), e uma linha secundária do Fe (358,120 nm). As condições experimentais foram otimizadas usando soluções padrão multielementares e 2 amostras de suplemento alimentar. A mistura de Pd/Mg(NO₃)₂ foi usada como modificador químico. A temperatura de pirólise foi de 700 °C e as de atomização do Cd e Cr e Fe (determinados simultaneamente) foram 1700 e 2600 °C, respectivamente. Nas condições otimizadas foram obtidos sinais analíticos simétricos e reprodutíveis para Cd, Cr e Fe. Por conta das diferentes concentrações dos analitos nas amostras, foi explorada a possibilidade de uso de diferentes *pixels* para a avaliação do sinal analítico desses elementos, uma característica única da HR-CS GF AAS, assim como a introdução de fluxo de Ar na etapa de atomização, com o objetivo de diluir a nuvem atômica. Por conta disso, três condições experimentais foram estabelecidas a fim de se obter uma faixa mais ampla de trabalho. Para calibração, foram utilizadas soluções padrão aquosas multielementares. Os LODs encontrados na condição

de maior sensibilidade foram, respectivamente, 1,9 µg kg⁻¹ para Cd, 4,8 µg kg⁻¹ para Cr e 0,7mg kg⁻¹ para Fe. A exatidão foi estabelecida por meio da análise de um CRM e os valores encontrados foram concordantes com os certificados, à um nível de confiança de 95%. Após, foram avaliadas dez amostras de suplementos alimentares. As concentrações de Cd, Cr e Fe nas amostras variaram de 33,3 a 120 µg kg⁻¹, 0,28 a 17,6 mg kg⁻¹ e 2,99 a 138 mg kg⁻¹, respectivamente. Os valores encontrados foram comparados com os valores estabelecidos pela ANVISA, por meio da Resolução RDC Nº 243/2018 e Instrução Normativa Nº 28/2018, e foi realizada a análise de rotulagem.

Conclusões

A técnica de HR-CS GF AAS se mostrou eficaz para a determinação simultânea e sequencial de Cd, Cr e Fe em suplementos alimentares, fornecendo sensibilidade e precisão adequadas para amostras, com diferentes matrizes. As características da técnica permitiram alcançar condições com diferentes sensibilidades, tornando possível a análise de amostras com faixas de concentração dos analitos bem distintas. Foi observado que os valores de Cr e Fe estão em conformidade com os valores estipulados pela ANVISA para essa categoria e faixa etária. O trabalho também evidenciou a presença de Cd em algumas amostras, porém esses valores estão abaixo do estabelecido pela Farmacopeia Brasileira².

Agradecimentos

CAPES

Referências

- (1) ANVISA, RDC Nº 243, DE 26 DE JULHO DE 2018
- (2) ANVISA, Agência Nacional de Vigilância Sanitária. Farmacopeia Brasileira, 6ª edição 2019.

Determinação da textura em solos utilizando a espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS) associada a métodos quimiométricos

Jocelene Soares^{1*}(PG), José G. L. Abich²(IC), Gilson A. Helfer³(PQ), Adilson B. da Costa^{1,3}(PQ)

¹ Universidade de Santa Cruz do Sul, Programa de Pós-Graduação em Tecnologia Ambiental, Santa Cruz do Sul, RS, Brasil, 96815-900.

² Universidade de Santa Cruz do Sul, Departamento de Engenharias, Arquitetura e Computação, Santa Cruz do Sul, RS, Brasil, 96815-900.

³ Universidade de Santa Cruz do Sul, Programa de Pós-Graduação em Sistemas e Processos Industriais, Santa Cruz do Sul, RS, Brasil, 96815-900.

*e-mail: s.jocelene@gmail.com

Palavras Chave: NIRS, Análise multivariada, Silte, Areia e Argila.

Introdução

Para a determinação dos atributos físicos solo são utilizadas metodologias analíticas que geram resíduos químicos, sendo consideradas de alto custo e demoradas. Desta forma, a espectroscopia do infravermelho próximo (NIRS) é uma técnica não destrutiva, de custo acessível, requer o mínimo de preparo de amostra, não utiliza reagentes químicos e ainda possibilita o desenvolvimento de equipamentos portáteis. O objetivo foi avaliar o desempenho de equipamentos de infravermelho próximo, de bancada e portátil, para determinar a textura do solo, expressa nos percentuais de silte, areia e argila, utilizando métodos quimiométricos. Amostras de solo foram coletadas para a determinação de areia, silte e argila pelo método de referência.¹ Os espectros foram adquiridos por um espectrofotômetro de infravermelho de bancada (*Spectrum 400, Perkin Elmer, USA*) com acessório de infravermelho próximo, entre 1100 a 2500 nm e por um espectrofotômetro portátil DLP NIRscan Nano EVM (*Texas Instruments, USA*), entre 900 a 1700 nm. Para a construção dos modelos de calibração foi utilizado o software SOLO+MIA (*Eigenvector Research, Inc. 2018*).

Resultados e discussão

Os resultados obtidos utilizando as duas metodologias desenvolvidas, com cada um dos equipamentos estão demonstrados na Tabela 1. Os melhores resultados utilizando o espectrofotômetro de bancada foram obtidos após pré-processamento dos espectros utilizando suavização por filtro *Savitzky-Golay*, correção dispersão multiplicativa (MSC) e com os espectros centrado na média. Para o espectrofotômetro portátil, foi aplicado apenas o filtro *Savitzky-Golay* com os espectros centrados na média². A seleção dos conjuntos de calibração (66%) e validação (34%) foi feita utilizando o algoritmo *Kennard-Stone*. Para o modelo de regressão

foi utilizado o método por mínimos quadrados parciais (PLS) para a predição de silte, areia e argila.

Tabela 1. Resultados dos modelos PLS para a metodologia de bancada (MB) e portátil (MP).

Parâmetros	Areia		Silte		Argila	
	MB	MP	MB	MP	MB	MP
VL	9	7	9	7	8	10
R ² _{CAL}	0,92	0,68	0,87	0,63	0,91	0,87
R ² _{CV}	0,85	0,43	0,77	0,37	0,80	0,69
R ² _{PRED}	0,94	0,66	0,88	0,61	0,92	0,77
RMSEP, %	2,11	5,17	1,50	2,71	2,32	4,18
Faixa, %	74-40		2-24		20 -52	

VL - Variáveis latentes; R²_{CAL} - Coeficiente de determinação de calibração; R²_{CV} - Coeficiente de determinação de validação cruzada; R²_{PRED} - Coeficiente de determinação de predição; RMSEP – Raiz quadrada do erro médio de predição.

Conclusões

O desempenho entre as metodologias NIRS demonstrou melhores resultados para a MB. No que se refere aos valores de RMSEP para os parâmetros avaliados a MP apresentou resultados superiores a MB, necessitando de protocolos específicos para o desenvolvimento de modelos de análise multivariada

Agradecimentos

CAPES – FAPERGS – UNISC

Referências

- (1) Teixeira, P. C., G. Kangussu, D. Ademir, F. Wenceslau and G. Teixeira Manual de Métodos de Análise de Solo, 2017, Brasília – DF- EMBRAPA.
- (2) FERREIRA, M. M. C. Quimiometria: conceitos, métodos e aplicações. 2015. 493 p

Os resultados obtidos por CV-AAS são mesmo confiáveis? Avaliação de interferências química e espectral na determinação de mercúrio em sementes por CV-AAS

Gustavo Flores^{1*}(IC), Leandro Kolling¹(PQ), Leandro dos Santos^{1,2}(PG), Morgana B. Dessuy¹(PQ)
***e-mail: gustavofloresflg@gmail.com**

¹ Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves, 9500, Porto Alegre, Brasil.

² Instituto Federal Sul-rio-grandense, Praça 20 de Setembro, 455, Pelotas, Brasil.

Palavras Chave: Alimentos, Sementes comestíveis, Metais-traço, Contaminantes, MW-AD, Preparo de amostras

Introdução

O crescente problema global da contaminação ambiental por metais potencialmente tóxicos, com destaque para o mercúrio, tem impulsionado buscas por métodos eficientes de determinação. A exposição a esse elemento pode causar sérios danos à saúde e a ingestão de alimentos contaminados é uma das principais vias de exposição para a população¹. Dado que sementes comestíveis são amplamente consumidas na alimentação humana e que a legislação brasileira² não estabelece limites de Hg neste tipo de produto, esta pesquisa desempenha um papel crítico na avaliação da segurança alimentar. Diante disso, tem-se como objetivo desenvolver um método analítico para quantificar mercúrio em sementes de abóbora, amaranto, chia, girassol e quinoa por espectrometria de absorção atômica com geração de vapor frio (CV-AAS), empregando digestão ácida assistida por micro-ondas (MW-AD) para o preparo das amostras. Os resultados obtidos serão comparados com os da análise direta das amostras sólidas, usando um analisador de Hg por combustão.

Resultados e discussão

Para a digestão das sementes usando a técnica de MW-AD (Multiwave PRO, Anton Paar, Áustria), foram usados ácidos inorgânicos fortes (HNO₃, H₂SO₄ e HCl) e H₂O₂ em diferentes concentrações, individualmente ou combinados em diferentes proporções. Analisou-se as amostras digeridas por CV-AAS (FIMS-400, PerkinElmer, EUA) e as amostras sólidas no analisador DMA-80 (Milestone, Itália). Os resultados são apresentados na Tabela 1. Considerando-se que o limite de detecção (LOD) do DMA-80 é de 0,3 µg kg⁻¹, observa-se que os resultados foram bem discrepantes. Além disso, os resultados dos ensaios de recuperação via CV-AAS não foram satisfatórios em nenhuma condição experimental avaliada³. Esses resultados

sugerem que há interferências, tanto química quanto espectral, causadas por gases NOx gerados durante a digestão, na etapa de redução do analito à Hg^{0(g)} por CV-AAS⁴.

Tabela 1. Comparação entre as concentrações de Hg nas amostras obtidas por CV-AAS e no analisador DMA-80.

Amostra	CV-AAS ^a (µg kg ⁻¹)	DMA-80 ^b (µg kg ⁻¹)
Abóbora	46	<LOD
Amaranto	56	<LOD
Chia	354	<LOQ ^c
Girassol	278	<LOQ ^c
Quinoa	220	<LOQ ^c

(a) Digestão com 14 mol L⁻¹ HNO₃ e 30 % H₂O₂ (v v⁻¹);

(b) Método comparativo; (c) LOQ: 1,1 µg kg⁻¹ Hg.

Conclusões

Os ensaios preliminares mostram que os resultados obtidos por CV-AAS estão incorretos devido a presença de interferências, tanto química quanto espectral. Na apresentação desse trabalho serão mostrados os estudos realizados para comprovar essas interferências bem como as formas de corrigi-las.

Agradecimentos

Agradecemos à CAPES e à Pró-Reitoria de Pesquisa (PROPESQ) da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), por proporcionarem as condições para a realização desta pesquisa.

Referências

- (1) de Souza, J. R.; Barbosa, A. C. *Química e Sociedade*. **2000**, 12, 3.
- (2) Brasil. Ministério da Saúde. Agência Nacional de Vigilância Sanitária. Instrução Normativa 160, de 1º de julho de 2022.
- (3) INMETRO. DOQ-CGCRE-008: revisão 09.
- (4) Rokkjær, I.; Hoyer, B.; Jensen, N. *Talanta*. **1993**, 40, 729.

Sorção de azul de metileno em hidrogéis de goma arábica

Carolina Lona^{1*} (IC), Carolina Kuberesky¹ (IC), Mirlene Pereira Vitorino² (PG), Karine Priscila Naidek^{1,2} (PQ), Alexandre Tadeu Paulino^{1,2+} (PQ)

¹Departamento de Química, Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville, SC, Brasil

²Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville, SC, Brasil

Emails: *carolinazona02@gmail.com; +alexandre.paulino@udesc.br

Palavras-Chave: Tratamento de Águas Residuais, Hidrogel, Corante, Química Ambiental.

Introdução

Hidrogéis de goma arábica são matrizes poliméricas contendo grupamentos carboxílicos em suas estruturas, os quais o tornam um material viável para remover corantes catiônicos de soluções aquosas (1), como o azul de metileno por exemplo. O objetivo nessa pesquisa foi a remoção de azul de metileno de água utilizando hidrogel de goma arábica e hidrogel de goma arábica modificado com dióxido de titânio (TiO₂). O TiO₂ foi incorporado ao hidrogel com o objetivo de testar a recuperação de adsorvente e adsorbato após os ensaios de sorção empregando fotocatalise heterogênea. No presente estudo foi preliminarmente testado a sorção do corante no hidrogel e estudadas cinéticas de sorção de primeira e segunda ordem.

Resultados e discussão

O ensaio de sorção em função do tempo de contato para fazer uma análise das cinéticas de sorção foi realizado utilizando incubadora shaker orbital, mantendo o sistema a 20°C e 100 rpm. A concentração inicial de azul de metileno foi de 3,49 mg L⁻¹. A partir dos resultados de capacidade de sorção em função do tempo, foi possível aplicar modelos cinéticos de pseudo primeira e pseudo segunda ordem para entender alguns fenômenos envolvidos no processo. Os dados obtidos com os modelos cinéticos não lineares de pseudo primeira e pseudo segunda ordem estão na Tabela 1, sendo a sigla HGA designada para referir-se ao hidrogel de goma arábica e HGA5% ao hidrogel de goma arábica com adição de 5% de TiO₂. O processo de sorção de HGA/HGA5% segue a cinética de pseudo primeira ordem, após comparar os valores de R² e χ², sendo a capacidade máxima de sorção (q_e) próximo de 5,0 mg g⁻¹. Com isso, conclui-se que ocorre fisissorção entre adsorbato e adsorvente (2).

Tabela 1. Resultados dos modelos cinéticos de pseudo primeira ordem e pseudo segunda ordem para a sorção de azul de metileno em hidrogéis de goma arábica.

Modelo Cinético não linear	Parâmetros	HGA	HGA5%
Pseudo Primeira Ordem	q _e	1,17	4,62
	R ²	0,92	0,89
	K	0,002	3,15E-4
	χ ²	0,014	0,05
Pseudo Segunda Ordem	q _e	1,59	9,22
	R ²	0,89	0,88
	K	0,018	1,69E-5
	χ ²	0,0011	0,05

^aq_e: capacidade de sorção, R²: coeficiente de correlação, χ²: teste estatístico qui-quadrado, K: constante de velocidade.

Conclusões

É possível analisar quais interações ocorrem entre adsorbato e adsorvente, e prever metodologias de recuperação de corante e material sólido adsorvente.

Agradecimentos

CNPq (Processo: 313064/2022-9), FAPESC (Termo de outorga 2023/TR331), CAPES (Código de Financiamento 001).

Referencias

- (1) REIS, A.C. Dissertação (Programa de Pós-Graduação em Química) - Universidade Estadual de Ponta Grossa, Ponta Grossa. 2021, 100.
- (2) FILHO, W.B.F. Dissertação (Programa de Pós-Graduação em Química) - Universidade do Estado de Santa Catarina. Joinville 2022, 102.

Cinéticas de sorção de azul de metileno em hidrogéis de quitosana

Carolina Kuberesky^{1*} (IC), Carolina Lona¹ (IC), Mirlene Pereira Vitorino² (PG), Karine Priscila Naidek^{1,2} (PQ), Alexandre Tadeu Paulino^{1,2+} (PQ)

¹Departamento de Química, Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville, SC, Brasil

²Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville, SC, Brasil

Emails: *carolkuberesky@gmail.com; +alexandre.paulino@udesc.br

Palavras-Chave: Hidrogel, Quitosana, Azul de Metileno, Remoção, Poluente.

Introdução

O azul de metileno (AM) é um corante catiônico, o qual é utilizado em diversas aplicações na indústria. Um dos principais fatores de poluição da água é a contaminação por conta de resíduos industriais contendo esse tipo de corante (1). Uma possível solução para remover AM de águas residuais e efluentes é a utilização de hidrogéis. Esses tipos de materiais possuem estruturas poliméricas tridimensionais com grande capacidade de absorção de água (2). O hidrogel sintetizado neste trabalho é o hidrogel de quitosana sem e com modificação por dióxido de titânio (TiO₂). O principal objetivo deste trabalho é analisar os modelos cinéticos da adsorção de AM em hidrogel de quitosana/quitosana modificado com 1% de TiO₂.

Resultados e discussão

Os ensaios de sorção de corante nos hidrogéis de quitosana em função do tempo de sorção foram realizados utilizando 20°C, 100 rpm, 100 mg de hidrogel, e 100mL de solução de corante 10 mg L⁻¹. Nesse estudo, avaliou-se os modelos cinéticos não lineares de pseudo primeira ordem e pseudo segunda ordem, com os resultados apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Resultados dos modelos cinéticos de pseudo primeira ordem e pseudo segunda ordem para a sorção de azul de metileno (AM) em hidrogel de quitosana (HQT) e hidrogel de quitosana modificado com 1% de TiO₂ (HQT1%).

Modelo Cinético	Parâmetros	HQT	HQT1%
Pseudo Primeira Ordem	q _e	10,81	8,36
	K ₁	0,01315	0,0715
	R ²	0,90238	0,76005
	χ ²	1,53613	1,48043
Pseudo Segunda Ordem	q _e	11,60	8,80
	K ₂	0,00162	0,01211
	R ²	0,91522	0,84926
	χ ²	1,3319	0,93002

Para ambos os hidrogéis o melhor modelo que descreve o processo de sorção é o modelo não linear de pseudo segunda ordem, visto que tanto para HQT como para HQT1% os valores de R² foram maiores e χ² menores. Isto indica que o processo de sorção ocorre por quimissorção (3). Ou seja, há interação química entre o adsorvente e o meio, com formação de ligação química covalente ou iônica (4). A capacidade máxima de sorção (q_e) foi maior para HQT em comparação com HQT1% pois o óxido metálico ocupa sítios ativos de sorção dentro da rede do hidrogel.

Conclusões

Os hidrogéis de quitosana são possíveis soluções para a remoção de poluentes como o AM de águas residuais. A adição de TiO₂ ao hidrogel de quitosana não influenciou significativamente o valor de q_e.

Agradecimentos

CNPq (Processo: 313064/2022-9), FAPESC (Termo de outorga 2023/TR331), CAPES (Finance code 001)

Referencias e notas

- (1) Oliveira, S.P.; Silva, W. L.L.; Viana, R.R. *Cerâmica*, **2013**, 59, 338-344.
- (2) Aouada, F.A.; Mattoso, L.H.C. *Boletim de Pesquisa e Desenvolvimento. Embrapa*. **2009**, 32.
- (3) Filho, W. B. F. Dissertação de Mestrado – Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville, 2022, 102.
- (4) Sampaio, L. R. Tese de Doutorado – Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2014, 123.

AValiação DE SUPLEMENTOS PROTEICOS ATRAVÉS DA DETERMINAÇÃO ELEMENTAR POR MIP OES E ANÁLISE EXPLORATÓRIA DE DADOS

Jéssica da R. Porto (PG)^{1*}, Yasmin R. Bloedorn (PG)¹, Charlie G. Gomes (PG)¹, Daisa H. Bonemann (PG)¹, Anderson S. Ribeiro (PQ)¹.

¹Universidade Federal de Pelotas, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Capão do Leão, RS, Brasil, 96160-000.
*e-mail: jporto8.jp@gmail.com

Palavras-Chave: Suplementos proteicos, Análise exploratória de dados, Análise de componentes principais, MIP OES.

Introdução

Os suplementos proteicos apresentam em sua composição macro e microminerais, sendo de extrema importância a determinação destes elementos¹. Técnicas de emissão atômica multielementares, como a Espectrometria de emissão óptica por plasma induzida por micro-ondas (MIP OES), têm sido empregadas para monitorar elementos em diferentes tipos de amostras de alimentos². A partir da análise instrumental obtém-se uma enorme quantidade de dados sendo necessário a utilização de ferramentas, como a análise exploratória de dados, a fim de transformar os dados obtidos em informações químicas relevantes. A análise de componentes principais (PCA) é um método de classificação não-supervisionado que tem como objetivo projetar os dados multivariados em um espaço de dimensão reduzido, porém mantendo a relação original, a fim de evidenciar as relações existentes entre variáveis e amostras³. Assim, este trabalho tem como objetivo avaliar a concentração elementar em amostras de suplementos proteicos a partir da análise de componentes principais.

Resultados e discussão

A PCA é composta pela componente principal (PC) 1 que explica 34,12% dos dados originais e pela componente principal 2 que explica 21,19%, totalizando 55,31% da variância. A partir do gráfico de *loadings*, Figura 1a, é possível observar a relação entre as variáveis. Nota-se uma correlação negativa entre o Na e o eixo da PC1, enquanto Zn, K, Ba, Al, Mg e V apresentam correlação positiva com a PC1, o que indica que amostras com maiores concentrações de Na apresentam menores concentrações dos demais elementos. Os elementos que apresentam maior influência nas amostras são Ca, Fe, K, Mg, Mn e V, enquanto o Na possui pouca influência. Pode-se observar que o Fe e o Mn estão correlacionados positivamente entre si, o que significa que amostras com altas concentrações de Fe, tendem a apresentar também altas concentrações de Mn. Enquanto Zn, Ba e K possuem correlação negativa com Fe e Mn. A partir

do gráfico de *scores*, Figura 1b, pode-se observar a relação entre as amostras. A amostra WP-15, por exemplo, apresentou as maiores concentrações de Fe e Mn. As amostras WP-3, WP-9, WP-11 e WP-13 são do mesmo sabor e apresentam composição elementar similar. As amostras WP-2 e WP-6 são da mesma marca, o que pode justificar o seu agrupamento.

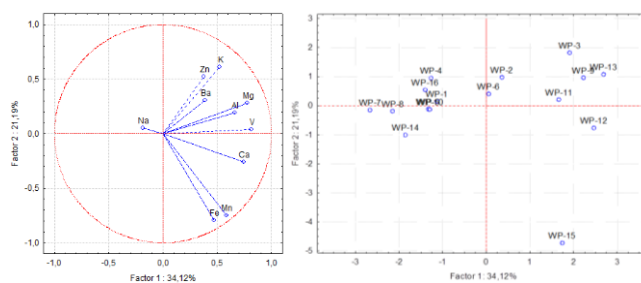


Figura 1. (a) Gráfico de *loadings* da PC1 versus PC2 e (b) Gráfico de *scores* da PC1 versus PC2.

As amostras localizadas no quarto quadrante apresentam baixas concentrações de Fe e Mn, juntamente com a amostra WP-14; as amostras WP-11, WP-12 e WP-13 possuem altas concentrações de Ca e V.

Conclusões

A partir da análise de componentes principais foi possível observar relações entre variáveis e amostras, além de compreender melhor os dados simultaneamente.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, INCTAA.

Referências e notas

- (1) Aquino, L.F.M.C.; Ribeiro, R.O.R.; Simoes, J.S.; Mano, S.B.; Mársico, E.T.; Conte Junior, C.A., *J. Food Compos. Anal.* **2017**, 59, 141.
- (2) Bonemann, D.H.; Luckow, A.N.B.; Pereira, C.C.; Souza, A.O.; Cadore, S.; Nunes, A.M.; Vieira, M.A.; Ribeiro, A.S., *J. Food Compos. Anal.* **2021**, 96, 103716.
- (3) Ferreira, M. M. C. *Editora UNICAMP*. **2020**, 2ª ed., 496.

Determinação da textura em solos utilizando a espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS) associada a métodos quimiométricos

Jocelene Soares^{1*} (PG), José G. L. Abich² (IC), Gilson A. Helfer³ (PQ), Adilson B. da Costa^{1,3} (PQ)

¹ Universidade de Santa Cruz do Sul, Programa de Pós-Graduação em Tecnologia Ambiental, Santa Cruz do Sul, RS, Brasil, 96815-900.

² Universidade de Santa Cruz do Sul, Departamento de Engenharias, Arquitetura e Computação, Santa Cruz do Sul, RS, Brasil, 96815-900.

³ Universidade de Santa Cruz do Sul, Programa de Pós-Graduação em Sistemas e Processos Industriais, Santa Cruz do Sul, RS, Brasil, 96815-900.

*e-mail: s.jocelene@gmail.com

Palavras Chave: NIRS, Análise multivariada, Silte, Areia e Argila.

Introdução

Para a determinação dos atributos físicos solo são utilizadas metodologias analíticas que geram resíduos químicos, sendo consideradas de alto custo e demoradas. Desta forma, a espectroscopia do infravermelho próximo (NIRS) é uma técnica não destrutiva, de custo acessível, requer o mínimo de preparo de amostra, não utiliza reagentes químicos e ainda possibilita o desenvolvimento de equipamentos portáteis. O objetivo foi avaliar o desempenho de equipamentos de infravermelho próximo, de bancada e portátil, para determinar a textura do solo, expressa nos percentuais de silte, areia e argila, utilizando métodos quimiométricos. Amostras de solo foram coletadas para a determinação de areia, silte e argila pelo método de referência.¹ Os espectros foram adquiridos por um espectrofotômetro de infravermelho de bancada (*Spectrum 400, Perkin Elmer, USA*) com acessório de infravermelho próximo, entre 1100 a 2500 nm e por um espectrofotômetro portátil DLP NIRscan Nano EVM (*Texas Instruments, USA*), entre 900 a 1700 nm. Para a construção dos modelos de calibração foi utilizado o software SOLO+MIA (*Eigenvector Research, Inc. 2018*).

Resultados e discussão

Os resultados obtidos utilizando as duas metodologias desenvolvidas, com cada um dos equipamentos estão demonstrados na Tabela 1. Os melhores resultados utilizando o espectrofotômetro de bancada foram obtidos após pré-processamento dos espectros utilizando suavização por filtro *Savitzky-Golay*, correção dispersão multiplicativa (MSC) e com os espectros centrado na média. Para o espectrofotômetro portátil, foi aplicado apenas o filtro *Savitzky-Golay* com os espectros centrados na média². A seleção dos conjuntos de calibração (66%) e validação (34%) foi feita utilizando o algoritmo *Kennard-Stone*. Para o modelo de regressão

foi utilizado o método por mínimos quadrados parciais (PLS) para a predição de silte, areia e argila.

Tabela 1. Resultados dos modelos PLS para a metodologia de bancada (MB) e portátil (MP).

Parâmetros	Areia		Silte		Argila	
	MB	MP	MB	MP	MB	MP
VL	9	7	9	7	8	10
R ² CAL	0,92	0,68	0,87	0,63	0,91	0,87
R ² CV	0,85	0,43	0,77	0,37	0,80	0,69
R ² PRED	0,94	0,66	0,88	0,61	0,92	0,77
RMSEP, %	2,11	5,17	1,50	2,71	2,32	4,18
Faixa, %	74-40		2-24		20 -52	

VL - Variáveis latentes; R² CAL - Coeficiente de determinação de calibração; R² CV - Coeficiente de determinação de validação cruzada; R² PRED - Coeficiente de determinação de predição; RMSEP – Raiz quadrada do erro médio de predição.

Conclusões

O desempenho entre as metodologias NIRS demonstrou melhores resultados para a MB. No que se refere aos valores de RMSEP para os parâmetros avaliados a MP apresentou resultados superiores a MB, necessitando de protocolos específicos para o desenvolvimento de modelos de análise multivariada

Agradecimentos

CAPES – FAPERGS – UNISC

Referências

- (1) Teixeira, P. C., G. Kangussu, D. Ademir, F. Wenceslau and G. Teixeira Manual de Métodos de Análise de Solo, 2017, Brasília – DF- EMBRAPA.
- (2) FERREIRA, M. M. C. Quimiometria: conceitos, métodos e aplicações. 2015. 493 p

Proposta de descarga de baterias de íon lítio para reciclagem por método eletroquímico

Nicolas M. M. Barreto¹ (IC) Vanessa A. Matias¹ (TC), Rogério Corrêa^{1, 2} (PQ), Albertina X. da R. Correa¹ (PQ), Marcus V. N. Simioni Filho¹ (PQ) * acorrea@univali.br

¹LaPeQ – Multiusuário UNIVALI, ²Laboratório de Síntese Orgânica -UNIVALI.

Palavras Chave: bateria de lítio, descarga, reciclagem, voltagem, tensão, cátodo e ânodo

Introdução

A importância do debate sobre a reciclagem de baterias se dá por inúmeros motivos, conforme demonstrado na Figura 1^{1, 2 e 3}.



Figura 1. Esquema representativo da importância da reciclagem de baterias, com enfoque no método de descarga.

Resultados e discussão

Foram utilizados 4 tipos de baterias/modelo: Samsung® 11CP6/57/61 SM-G530F, LG® LGIP-531A, Sony® NP-BG1 e Canon® LP-E8. Optou-se por não remover adesivos e partes plásticas das baterias para a proteção da carcaça. A abordagem experimental está descrita na Figura 2.



Figura 2. Fluxograma simplificado da parte experimental.

Tabela 1. Médias das tensões das baterias por marca e tratamento. V_i para voltagem inicial, V_f para voltagem final.

Marca	NaCl 0,1M**		FeSO ₄ 0,1M		NaCl 0,1M + lã de aço	
	V_i	V_f	V_i	V_f	V_i	V_f
Samsung®	3,70	0,72	3,67	0,00	3,70	0,89
LG®	3,31	0,00	3,60	0,00	3,60	0,10
Sony®	3,60	0,01	3,60	3,33*	3,60	0,41
Canon®	7,21	0,00	7,56	0,00	7,53	1,27

*Diferença na coluna, **Diferença na linha

O teste de ANOVA, seguido pelo post hoc Tukey apontou o método de descarga NaCl 0,1M como o mais

eficiente [$F(2,24)=5,369$; $p<0,05$] e a bateria da marca Sony® como a mais difícil de descarregar [$F(3,24)=9,137$; $p<0,01$] (Tabela 1). A corrosão e os resíduos estão representados na Figura 3.

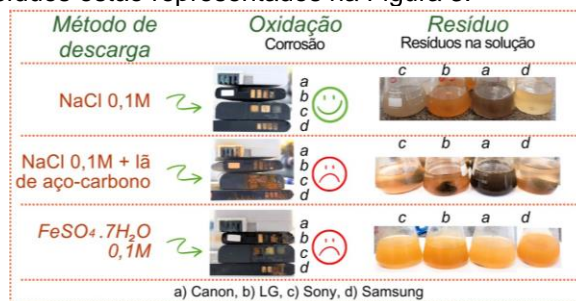


Figura 3. Esquema representativo dos resultados de corrosão e resíduos.

Após decantação, os tratamentos NaCl + lã de aço e carbono e FeSO₄ apresentaram mais sólidos decantados e maior oxidação dos ânodos e cátodos.

Conclusões

Concluiu-se que é possível utilizar métodos eletroquímicos para descarga (Figura 4). Para trabalhos futuros sugere-se que outras marcas e tempos sejam testados e que os resíduos sejam analisados para reuso e/ou correto descarte.

Melhor descarga NaCl 0,1M
Menos corrosivo NaCl 0,1M
Difícil descarga Sony
Decantação Todos

Figura 4. Descrição dos resultados mais expressivos.

Agradecimentos

À delegacia da Alfândega da RFB, em Itajaí, pelo fornecimento das baterias utilizadas nos ensaios.

Referencias e notas

- (1) Habib, K.; Hansdóttir, S. T.; Habib, H. 2020. Critical metals for electromobility: Global demand scenarios for passenger vehicles, 2015–2050. Resources, Conservation and Recycling, v. 154.
- (2) Instituto Federal Alemão de Geociências e Recursos Naturais (BGR). Germany Hopes to Mine Lithium, the White Gold of e-Mobility' (DW Top Stories/Business, 19 August 2019). Disponível em: www.dw.com/en/germany-hopes-to-mine-lithium-the-white-gold-of-e-mobility/a-50073822. Acesso em 05 de set. 2023.
- (3) Ministério do Meio Ambiente (MMA), 2019. Ministério do Meio Ambiente celebra Acordo Setorial de Eletroeletrônicos. Disponível em <https://www.gov.br/mma/pt-br/noticias/ministerio-do-meio-ambiente-celebra-acordo-setorial-de-eletroeletronicos>. Acesso em 05 de set. 2023.

Determinação de bromo em polímeros espectrometria de absorção molecular de alta resolução com fonte contínua em forno de grafite (HR-CS GF MAS)

Rafaela Pirillo Bettim de Lima Piecas (IC)^{1*}, Ana Laura Neumann (IC)¹, Leandro Kolling (PQ)¹, Márcia Messias Silva (PQ)^{1,2}

*e-mail: rafaelapb02@gmail.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre – RS.

²Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia do CNPq – INCT de Energia e Meio Ambiente, Universidade Federal da Bahia, Salvador – BA.

Palavras-Chave: Polímeros, Microplásticos, Bromo, HR-CS GF MAS, Análise direta.

Introdução

Microplásticos (MPs) são um grande problema ambiental da atualidade pois estão presentes em todos os ambientes, incluindo diversos órgãos humanos. Além disso, a presença de elementos como Br, Sb, P e Al, geralmente adicionados na produção, podem agravar sua toxicidade^(1,2). Os compostos organobromínicos (BFRs) são muito utilizados em polímeros como retardantes de chama; esses compostos halogenados funcionam modificando o comportamento inflamável do material, impedindo com que a chama se propague. No entanto, esses aditivos podem gerar compostos extremamente tóxicos como os polibrominatos dibenzofuranos (PBDFs) e os polibrominatos dibenzo dioxinas (PBDDs)⁽³⁾. Este trabalho propõe investigar a possibilidade da utilização da técnica de Espectrometria de Absorção Molecular de Alta Resolução com Fonte Contínua e Forno de Grafite (HR-CS GF MAS), para a análise direta em amostras reais de plásticos.

Resultados e discussão

Para a construção da curva de calibração o NaBr foi usado como padrão de Br. O método consiste em pesar a amostra, moída previamente, diretamente na plataforma de grafite, utilizando uma balança microanalítica; após a adição, sobre a amostra, de 15 µL da solução Ca (20g L⁻¹) como agente formador da molécula de CaBr e 10 µL da solução de Pd (3g L⁻¹) como modificador químico, o programa de temperatura era iniciado. O comprimento de onda utilizado para monitorar a molécula CaBr foi $\lambda=625,3113$ nm (Figura 1). Os limites de determinação e quantificação encontrados foram 16 e 54 mg kg⁻¹, respectivamente. A massa característica mo obtida foi de 3 ng. Os testes iniciais feitos com o CRM ERM-EC680k, mostraram que o método é exato. Uma otimização multivariada está

sendo realizada para o conhecimento das condições ótimas para análise; que serão então aplicadas para a quantificação em amostras reais.

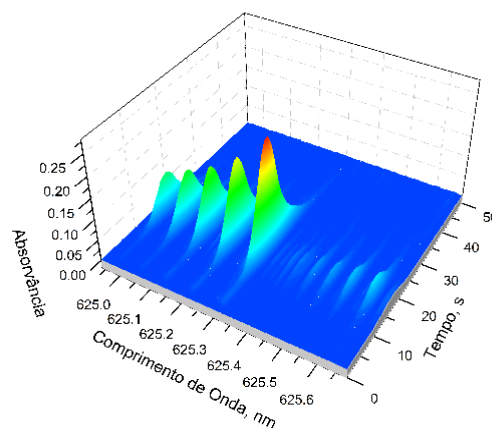


Figura 1. Espectro de absorção da molécula CaBr resolvido no tempo. $T_{\text{piro}}=1000^{\circ}\text{C}$, $T_{\text{vap}}=2100^{\circ}\text{C}$; agente formador da molécula e modificador químico, Ca 20 g L⁻¹ e Pd 3 g L⁻¹, respectivamente.

Conclusões

O método apresentado é simples e rápido. Testes iniciais mostraram boa exatidão e os resultados preliminares obtidos foram similares aos da literatura⁽⁴⁾.

Agradecimentos

Agradecimentos ao CNPq e a UFRGS.

Referências e notas

- (1) Bastyans, S. et al. *Emerg Top Life Sci.* **2022**, 6, 411-422.
- (2) Fernandes, A. et al. *J. Braz. Chem. Soc.* **2022**, 15, 341.
- (3) Shen, M. et al. *Science of The Total Env.* **2021**, 779, 146528.
- (4) Resano, M. et al. *Spectrochimica Acta.* **2013**, 88, 32-39.

Identificação da adulteração de farinhas de larvas de insetos utilizando a espectroscopia no infravermelho (NIRS) associada a métodos quimiométricos

Roberta O. Santos*¹(PG), Daniela da C. e Silva² (PG), Rafael M. da Silva² (PQ), Andreas Kohler² (PQ), Adilson B. da Costa^{1,2} (PQ)

¹ Universidade de Santa Cruz do Sul, Programa de Pós-Graduação em Sistemas e Processos Industriais, Santa Cruz do Sul, RS, Brasil

² Universidade de Santa Cruz do Sul, Programa de Pós-Graduação em Tecnologia Ambiental, Santa Cruz do Sul, RS, Brasil.

*eng.rosantos@gmail.com

Palavras-Chave: *Tenebrio molitor* BSF, Infravermelho, NIRS, Quimiometria, Adulteração.

Introdução

Atualmente observa-se um aumento nas pesquisas relacionada a utilização de insetos como fonte proteica, especialmente na forma de ingredientes, como farinhas, em produtos processados. Contudo, sua produção deve ser feita a partir de organismos selecionados, utilizando técnicas seguras de produção¹. Neste trabalho, investigou-se a aplicação da espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS) e regressão por mínimos quadrados (PLS) para identificar adulterações de farinha larvas de besouros *Tenebrio molitor* por farinha de larvas de *Hermetia Illucens* (BSF)². Os espectros das amostras de farinha adulterada (de 0 e 100%) foram adquiridas entre 1.000 a 2.500 nm, com auxílio de um espectrômetro Spectrum 400 (Perkin Elmer, USA), e os modelos foram desenvolvidos utilizando o software SOLO+MIA (Eigenvector Research, Inc.).

Resultados e discussão

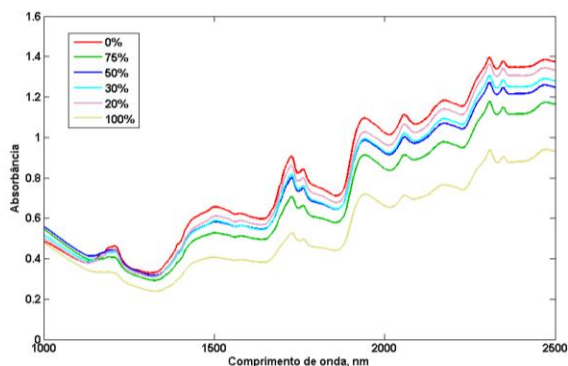


Figura 1. Espectros NIR (1.000 a 2.500 nm) de larvas de *Tenebrio molitor* adulterada com BSF

Na Figura 1 observa-se o perfil dos espectros de infravermelho médios produzidos pelos conjuntos de amostras com diferentes níveis de adulteração. A Figura 2 apresenta os resultados do modelo de PLS, utilizando

3 variáveis latentes, após pré-processamento que inclui 1ª derivada seguida dos dados centrados na média. Como resultado, obteve-se um coeficiente de determinação de validação cruzada (R^2_{CV}) superior a 0,99 e um baixo valor de erro (RMSECV) de 3,1%.

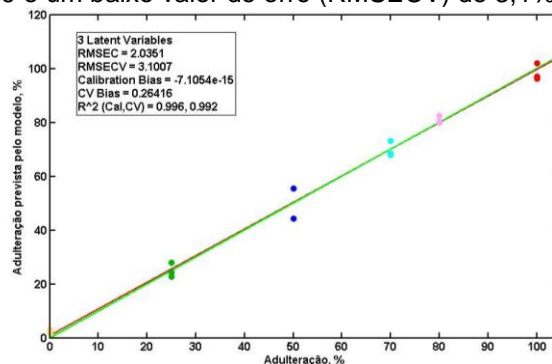


Figura 2. Correlação entre % de adulteração prevista pelo modelo e adulteração real das farinhas de *T. molitor* com larvas de BSF.

Conclusões

O método demonstrou ser útil na quantificação da adulteração de farinhas de *Tenebrio molitor* com farinha de BSF, apresentando como principais vantagens o curto tempo de análise, baixo custo e ausência de preparo de amostra.

Agradecimentos

UNISC, SICT, FAPERGS, CAPES, CNPq

Referencias

- (1) Benes, et al. "Analysis of wheat flour-insect powder mixtures based on their near infrared spectra." Food Chem X 13 (2022): 100266.
- (2) Ferreira, Marcia Miguel Castro. Quimiometria: conceitos, métodos e aplicações. Editora da UNICAMP, 2015.

Dispersão da matriz em fase sólida para análise de especiação de arsênio em algas comestíveis por LC-ICP-MS

Ana Claudia B. Luckow*,^a Letícia C. Brudi (PG),^b Eliézer Q. Oreste (PQ),^a Fábio A. Duarte (PQ),^b Carlos F. F. de Andrade (PQ),^a Ednei G. Primel (PQ),^a Bruno M. Soares (PQ)^a *luckowana@gmail.com*

^a Escola de Química e Alimentos, Universidade Federal do Rio Grande, 96203-900, Rio Grande, RS

^b Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria, 97105-900, Santa Maria, RS

Palavras Chave: MSPD, espécies de arsênio, química verde, preparo de amostras, LC-ICP-MS.

Introdução

O arsênio (As) apresenta toxicidade nas diferentes formas que pode ser encontrado. As principais espécies são as orgânicas como a arsenobetaina (AsB), o ácido dimetilarsínico (DMA) e o ácido monometilarsônico (MMA) e as inorgânicas como o arsenito (As(III)) e o arsenato (As(V)), as quais podem ser até cem vezes mais tóxicas do que as orgânicas. Para a quantificação, se faz necessário uma extração eficiente, sem interferentes e que garanta a integridade das espécies. Desta forma, existem diversos métodos já publicados, incluindo a extração assistida por micro-ondas (MAE) e a extração assistida por ultrassom (UAE). A dispersão da matriz em fase sólida (MSPD) é um método simples, baseado na maceração da amostra com um suporte sólido, o qual promove a sua ruptura física seguida de uma extração sólido-líquido. Portanto, o objetivo deste trabalho foi avaliar a MSPD para a extração de As(III), As(V), DMA e MMA em algas comestíveis com posterior determinação por cromatografia líquida acoplada à espectrometria de massa com plasma indutivamente acoplado (LC-ICP-MS).

Resultados e discussão

Os parâmetros da MSPD avaliados foram o tipo de suporte sólido (alumina, florissil, sílica, terra diatomácea e areia do mar); massa de suporte sólido (0,25; 0,5; 0,75 e 1 g); tipo de solução extratora (HNO₃ 0,01; 0,05; 0,1; 0,5; 1 mol L⁻¹ e água ultra pura); etapa de aquecimento (banho-maria a 50 °C por 10 min, banho ultrassônico por 10 min e sonda ultrassônica (15 W de potência) por 5 min). Além disso, foi feito um comparativo entre a concentração total de As no extrato da MSPD e a obtida após decomposição assistida por micro-ondas (MAD) e quantificação por ICP-MS. A exatidão foi avaliada empregando material de referência certificado (CRM) de farinha de arroz (1568b). As condições otimizadas foram: 0,25 g de amostra, 0,25 g de areia do mar, maceração por 5 min, a mistura foi submetida a aquecimento em

banho-maria a 50 °C por 10 min. A mistura resultante (amostra, suporte sólido e solução extratora) passou por agitação em vórtex por 1 min e centrifugação a 8000 rpm por 5 min, o extrato foi filtrado com filtros de seringa (0,45 µm). As condições cromatográficas foram adaptadas do trabalho desenvolvido por SEEGER (2019)². Coluna de troca aniônica PRP X100; fase móvel composta por (NH₄)H₂PO₄ 8,0 mmol L⁻¹ com pH 8,0 e vazão de 1,5 mL min⁻¹ (modo isocrático). As concentrações determinadas nas amostras de algas estiveram entre 0,56 e 2,4 µg g⁻¹; 0,28 a 2,19 µg g⁻¹ e 0,88 a 11,3 µg g⁻¹ para As(III), DMA e MMA, respectivamente. As(V) esteve abaixo do LD, exceto para a alga Hijiki (28 µg g⁻¹). Também foram determinadas algumas espécies desconhecidas (ED), nas quais foi obtido 0,47 µg g⁻¹ para ED1 na alga Hijiki e para a ED3 0,67 e 34 µg g⁻¹ para Hijiki e Kombu, respectivamente. O método mostrou boa concordância (97%) com o método comparativo. Da mesma forma, uma boa concordância com os valores certificados para a soma das espécies As(III) e As(V) (98%) e para o DMA (94%). O LOD foi de 0,01 µg g⁻¹.

Conclusões

Foi possível desenvolver um método para a determinação das espécies de As(III), As(V), DMA e MMA em algas comestíveis empregando MSPD e LC-ICP-MS, trazendo vantagens como simplicidade, emprego de somente água para a extração e ainda permitindo o uso de um suporte sólido de fonte renovável para a dispersão da amostra, a areia.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPERGS, FINEP, Centro Integrado de Análises/FURG e Laboratório de Análises Químicas Industriais e Ambientais/UFSM

Referencias e notas

(1) Seeger, T. S.; Tese. Universidade Federal de Santa Maria. 2019.

Estudo da degradação de contaminantes emergentes pelo processo de fotocatalise utilizando catalisadores à base de Nióbio

Martha Fogliato S. Lima¹(PQ), Leonardo R. Amaral¹(PG), Leonardo P. Pavan¹, Katia B. Gusmão¹(PQ), Anderson J. Schwanke¹(PQ), Mariana R. Gama Sato¹(PQ), Tânia M. Pizzolato^{1*} (PQ)

¹ Instituto de Química-Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves, 9500 Porto Alegre, Brazil

* tania.pizzolato@ufrgs.br

Palavras Chave: Fotocatálise, Contaminantes Emergentes, Catalisadores, Degradação Fotocatalítica

Introdução

Contaminantes emergentes são produtos potencialmente tóxicos que não são removidos ou eliminados pelos processos convencionais de tratamento de água para consumo humano [1-4]. Os fármacos são considerados contaminantes emergentes, pois encontram-se no meio aquático em concentrações da ordem de $\mu\text{g L}^{-1}$ e ng L^{-1} . Além disso, estes têm sido encontrados em grandes quantidades no ambiente e têm como via principal a água, ou seja, após serem usados ou ingeridos caem no sistema de esgoto, passam pelo sistema de tratamento e acabam em diferentes ecossistemas. Estudos realizados mostraram que esses compostos causam sérios danos à fauna aquática, como a feminização de peixes, alteração no desenvolvimento de moluscos e anfíbios e decréscimo de fertilidade de aves [5]. No caso de antibióticos, uma das grandes questões é a resistência bacteriana. Um dos processos oxidativos avançados que vem se destacando como bastante eficiente para a degradação de fármacos no ambiente aquático é a fotocatalise [6]. O objetivo deste trabalho, foi utilizar a fotocatalise com catalisadores à base de nióbio, para a degradação de fármacos betabloqueadores e antibióticos, que possam estar presentes no ambiente.

Resultados e discussão

Foram avaliados 3 catalisadores à base de nióbio, sintetizados pelo Laboratório de Reatividade e Catálise (LRC-UFRGS) em 7 diferentes compostos (4 betabloqueadores e 3 antimicrobianos). Os experimentos de fotocatalise foram realizados em câmara de irradiação sob radiação UV-A e UV-B. Os compostos foram quantificados por HPLC-UV. Os resultados da análise exploratória dos catalisadores selecionados mostraram que alguns destes foram efetivos na degradação fotocatalítica dos compostos avaliados, sendo classificados como promissores. Fármacos como o propranolol e o sulfametoxazol apresentaram altos índices de degradação, como mostra a Figura 1.

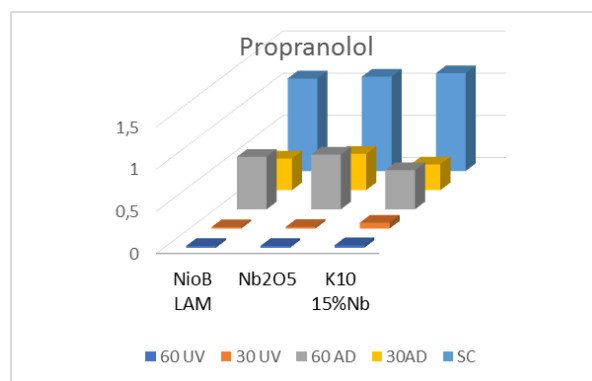


Figura 1. Variação da concentração do fármaco beta-bloqueador propranolol frente a catalisadores à base de nióbio. SC: concentração inicial, 30AD: 30 min adsorção, 60AD: 60 min adsorção, 30UV: 30 min irradiação, 60UV: 60 min irradiação (UVA+UVB).

Conclusões

Estes experimentos permitiram avaliar o desempenho fotocatalítico dos catalisadores frente aos fármacos selecionados. A partir destes resultados exploratórios, serão realizados estudos cinéticos para definir os parâmetros experimentais do processo proposto em diferentes matrizes aquosas.

Agradecimentos

Os autores agradecem à CAPES e à FAPERGS pelas bolsas de doutorado e pós-doc e ao projeto Inovaclean (FAPERGS) pelo suporte financeiro.

Referências e notas

- (1) Afonso-Olivares, Z., Sosa-Ferrera, J.J. Santana-Rodríguez, *Sci. Total Environ.* **2017** 599–600.
- (2) Nikolaou, A., Meric, S., Fatta, D., *Anal. Bioanal. Chem.* **2007**, 387,1225–1234.
- (3) Han Tran, N., Yew-Hoong Gin, K., *Sci. Total Environ.* **2017**, 599–600.
- (4) Kot-Wasik, A., Jakimska, A., Śliwka-Kaszyńska, M., *Environ. Monit. Assess.* **2016**, 188, 661.
- (5) Martín, J., Camacho-Muñoz, D., Santos, J.L., I. Aparicio, I., Alonso, E., *J. Hazardous Materials* **2012**, 40– 47.
- (6) Marothu Vamsi Krishna et al., *Arabian Journal of Chemistry* **2019**, 12, 1290-1297.

Decomposição assistida por radiação micro-ondas utilizando H₂O₂ e posterior determinação de impurezas elementares em amostras de IFAs por ICP-OES.

Isadora Silva Dornelles¹ (IC)*, Jennefer Queiroz¹ (IC), Cristian Pereira¹ (PG), Aline Muller¹ (PQ), Edson Muller¹ (PQ)

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria.

*isadora.dornelles@acad.ufsm.br

Palavras Chave: *Insumos Farmacêuticos Ativos, Impurezas elementares, Peróxido de hidrogênio, ICP-OES.*

Introdução

O controle de qualidade é fundamental durante as etapas de produção de medicamentos a partir de insumos farmacêuticos ativos (IFAs) e tem como objetivo assegurar a qualidade dos produtos que serão liberados para o consumo humano.¹ Impurezas elementares em produtos farmacêuticos são indesejáveis e podem estar presentes em pequenas quantidades nos IFAs apresentando danos à saúde humana.² A digestão por via úmida assistida por radiação micro-ondas (MAWD) usando peróxido de hidrogênio tem sido proposta como uma alternativa ecologicamente correta de método de preparo de amostras de matrizes orgânicas, pois apresenta mínima geração de resíduos e baixos níveis de acidez residual nos digeridos. Este trabalho teve como objetivo avaliar um método alternativo e ecologicamente correto usando H₂O₂ para a digestão de IFAs, usados no tratamento de hipertensão, em sistema de micro-ondas e posterior determinação de impurezas elementares por ICP-OES.

Resultados e discussão

Para a decomposição dos IFAs foi utilizado o método de decomposição por via úmida em sistema UltraWave®, que dispõe de 15 frascos de quartzo, com volume máximo de 15 mL cada. Massas de amostras de 100 a 500 mg foram decompostas utilizando um volume de 6 mL de H₂O₂. Hidroclorotiazida (HYD), captopril (CAP) e cloridrato de diltiazem (DIL) foram os fármacos estudados. Adicionalmente, temperaturas de digestão entre 190 e 250°C foram avaliadas. Massas de amostra de 500 mg, decompostas a uma temperatura de 250°C resultou em digeridos com valores de carbono residual inferiores a 2400 mg L⁻¹ para todos os IFAs avaliados. A acidez residual do método utilizando H₂O₂ apresentou melhores resultados quando comparados aos digeridos obtidos por HNO₃. Os valores de RCC foram calculados levando em consideração a massa molar de cada um dos IFAs. Ensaio de recuperação apresentaram

valores entre 91 e 110% para as impurezas elementares avaliadas (As, Cd e Co) concordando com os parâmetros recomendados pela Farmacopeia Brasileira. Os valores de RSDs alcançados foram entre 6,4 e 10% para todos os analitos e os limites de quantificação obtidos foram pelo menos duas vezes menores do que os limites máximos recomendados pela Farmacopeia Brasileira.

Conclusões

O método de digestão por via úmida assistida por radiação micro-ondas utilizando H₂O₂ pode ser considerado um método alternativo para digestão de IFAs anti-hipertensivos e concorda com as recomendações da Química Analítica Verde, pois nenhum reagente tóxico foi utilizado, a geração de resíduos foi mínima e os principais produtos da oxidação do H₂O₂ são oxigênio e água.

Agradecimentos

Ao Laboratório de Análises Químicas, Industriais e Ambientais (LAQIA), a Universidade Federal de Santa Maria (UFSM) e aos órgãos de fomento Coordenação e Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Referências e notas

- (1) Hardman, J. G.; Limbird, L. E.; Goodman e Gilmar: as bases farmacológicas da terapêutica. **2012**, 12.
- (2) Agência Nacional da Vigilância Sanitária, Farmacopeia Brasileira. **2010**, 15.

Como monitorar íons sulfato em etanol combustível? Uma proposta simples usando a espectrometria de absorção molecular em forno de grafite pode ser a solução

Ana Laura Neumann (IC)¹, Leandro Kolling (PQ)¹, Márcia M. da Silva (PQ)^{1,2*}

*e-mail: analauranmnn@gmail.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Avenida Bento Gonçalves 9500 Porto Alegre – RS.

²Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia do CNPq – INCT de Energia e Meio Ambiente, Universidade Federal da Bahia, Salvador – BA.

Palavras Chave: Biocombustíveis, Sulfato, HR-CS GF MAS, Pré-concentração, Contaminantes, Molécula diatômica.

Introdução

O etanol combustível, produzido a partir de biomassa, é uma fonte energética mais sustentável em comparação com os combustíveis fósseis. Contudo, contaminantes inorgânicos (como íons sulfato), provenientes da matéria-prima ou dos processos de produção, transporte e armazenamento deste biocombustível, podem prejudicar o seu desempenho em motores a combustão, causando o acúmulo de sólidos (incrustação) e aumentando o seu caráter corrosivo¹. Métodos convencionais de análise, como cromatografia de íons, para determinar essas impurezas², podem ser custosos e demorados. Neste trabalho, foi proposto um método alternativo, baseado no uso da espectrometria de absorção molecular de alta resolução com fonte contínua em forno de grafite (HR-CS GF MAS), para a determinação de íons sulfato em etanol combustível. As amostras foram pré-concentradas em sistema aquoso e analisadas no equipamento. A molécula diatômica CS foi estudada como molécula-alvo, monitorando a faixa de comprimentos de onda entre 257,913 nm até 258,198 nm. Para a construção da curva de calibração, as soluções de trabalho foram preparadas a partir da solução-estoque de 1000 mg L⁻¹ de sulfato, (Na₂SO₄). O modificador químico misto de Pd/Mg foi preparado pela adição em propan-2-ol de uma alíquota das soluções aquosas de 10 g L⁻¹ Pd e 10 g L⁻¹ Mg. Foram realizadas otimizações multivariadas para aprimorar a eficiência analítica, investigando as seguintes variáveis: temperaturas de vaporização e pirólise, e a quantidade de modificador químico.

Resultados e discussão

As condições ótimas obtidas foram aproximadamente 1000 °C de temperatura de pirólise, 2400 °C de temperatura de vaporização e 20/12 µg Pd/Mg como modificador químico. O limite de detecção encontrado

foi de 0,2 mg kg⁻¹ de sulfato, o coeficiente de determinação (R²) foi superior a 0,996 para uma faixa linear entre 0,5 e 20 mg kg⁻¹ de sulfato. Essa faixa de trabalho foi adequada, pois englobou a concentração estabelecida na legislação brasileira (4,0 mg kg⁻¹ de sulfato). Na Figura 1 são apresentadas as concentrações do analito obtidas utilizando o método proposto e um método comparativo³.

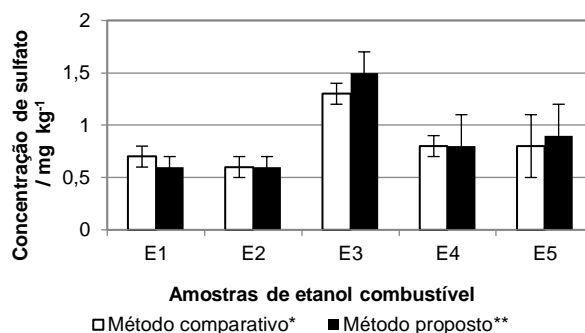


Figura 1. Comparação das concentrações de íons sulfato obtidas aplicando o método proposto e um método de referência (eletroforese capilar de zona³) para 5 amostras avaliadas (E1–E5).

Conclusões

Os resultados mostraram que o método proposto ofereceu resultados comparáveis a outros métodos analíticos, mas com vantagens econômicas e ambientais, pois permite reduzir as etapas de preparo de amostra e, conseqüentemente, o tempo de análise.

Agradecimentos

Agradecimentos ao CNPq e a UFRGS.

Referências e notas

- (1) Santos, L.N.;J.A.G.; Caldas, N.M. *Fuel*, **2012**, 9, 99
- (2) de Magalhães Avelar, H.;Barbeira, P.J.S. *Fuel*, **2007**, 86, 299.
- (3) E. Pereira, et al. *Anal. Bioanal. Chem.*, **2004**, 380, 178–182.

Determinação de metais em amostras do rio Piratini por MIP OES

*Lucas Lucena Ferreira¹ (IC), Yasmin R. Bloedorn (PG), Wiliam Boschetti¹ (PQ), Anderson S. Ribeiro¹ (PQ)

¹Universidade Federal de Pelotas (UFPEL); Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos; Capão do Leão, RS
 Palavras Chave: Água, metais, MIP OES.

Introdução

O descarte de efluentes contribui significativamente para a contaminação da água por metais e de acordo com as Nações Unidas, estima-se que 80% de todo efluente industrial e urbano é liberado sem nenhum tratamento prévio¹. Os metais podem ser divididos em essenciais ou potencialmente tóxicos para o organismo humano, onde a falta dos metais essenciais pode acarretar doenças, como a anemia por falta de ferro².

Para determinar a concentração de metais, existem diversas técnicas analíticas, como espectrometria de emissão óptica com plasma induzido por micro-ondas (MIP OES), no qual consiste em utilizar um plasma de nitrogênio para promover a excitação atômica. Esta técnica já foi aplicada com sucesso em diversas áreas, inclusive em análise de água³.

O objetivo deste estudo foi realizar a otimização dos parâmetros: posição de visualização, fluxo de nebulização e número de pixels, para posterior análise direta de amostras de água do rio Piratini. Das quais os pontos de 1 a 4 são referentes as águas do corpo hídrico e os pontos 5 e 6 a efluentes liberados no rio.

Resultados e discussão

Utilizou-se a otimização automática via software MP EXPERT para os parâmetros posição de visualização e fluxo de nebulização (L/min), onde os valores otimizados foram respectivamente para o Al 120 e 0,30; K 10 e 1,0; Mg 0 e 0,75; Mn -80 e 0,55. Já para o número de pixels, variou-se os valores de 1 a 9 pixels e a intensidade do sinal de cada elemento foi observada; sendo encontrado para todos os analitos o valor ótimo de 3 pixels.

Ao realizar as análises de água coletadas nos pontos 1 ao 4 do rio Piratini, foram obtidos os resultados expressos na Tabela 1. Ao se comparar estes resultados com a Legislação Brasileira, Conama 357, observa-se que todos os pontos apresentaram concentração de Al acima do limite estabelecido (0,02 ppm), ou seja, a captação de água para consumo humano não deveria acontecer. No entanto, a coleta da água que abastece o município é feita no ponto 4.

Já os pontos 5 e 6, onde há maior liberação de efluente urbano sem tratamento, os metais determinados encontram-se dentro dos padrões estabelecidos pela Conama 430, que trata dos limites para efluentes.

Tabela 1. Concentração média \pm desvio padrão (ppm) e desvio padrão relativo (RSD), dos elementos Al, K, Mg e Mn nos pontos 1 a 6

Ponto	Al	K	Mg	Mn
1	2,63 \pm 1,59 (60,29%)	<LD ^a	1,53 \pm 0,1 (6,79%)	<LQ ^b
2	3,57 \pm 0,08 (2,14%)	<LD ^a	1,58 \pm 0,1 (6,57%)	0,1 \pm 0 (0%)
3	4,12 \pm 0,2 (4,91%)	<LD ^a	1,38 \pm 0,24 (17,08%)	<LQ ^b
4	3,77 \pm 0,13 (3,34%)	<LD ^a	1,18 \pm 0,03 (2,44%)	<LQ ^b
5	1,08 \pm 0,13 (11,62%)	4,05 \pm 0,15 (3,7%)	9,63 \pm 0,25 (2,61%)	0,22 \pm 0,03 (13,32%)
6	3,52 \pm 0,08 (2,17%)	0,18 \pm 0,03 (15,75%)	1,95 \pm 0,09 (4,44%)	0,17 \pm 0,03 (17,32%)

^a LD do K = 0,01 ppm; ^b LQ do Mn = 0,05ppm.

Conclusões

Verificou-se que durante esta análise o rio Piratini estaria impróprio para o consumo humano após tratamento, o que é um de seus principais usos, visto que o ponto 4 foi coletado o local onde é retirada a água para tratamento e abastecimento humano, sendo assim é importante que o rio seja monitorado e verificado a possível causa desta contaminação.

Agradecimentos

Agradeço ao LabMeQui e ao meu orientador.

Referencias e notas

- (1) JOSEPH, Lesley et al. Chemosphere. 2019, 229, 142.
- (2) KLAASSEN, Curtis D.; WATKINS III, John B. 2009.
- (3) BALARAM, V. Microchemical journal. 2020, 159, 10586.

Determinação de níveis de cobre em amostras de sedimentos por espectroscopia de absorção atômica

Michele Espinosa da Cunha (PQ), Adriano Batista Souza (IC), Pedro Figueiredo da Silva (IC), Veridiana Krolow Bosenbecker (PQ), Pedro Jose Sanches Filho (PQ)

Grupo de Pesquisa em Contaminantes Ambientais –GPCA-IFSUL- Campus Pelotas; * pedrofilho@ifsul.edu.br

Palavras Chave: Metal pesado, Cobre, Absorção atômica,

Introdução

A Estrada do Engenho é uma zona residencial na cidade de Pelotas/RS, próxima ao canal São Gonçalo. Tal zona é alvo da disposição irregular de resíduos como eletroeletrônicos, que contém o metal pesado cobre. Este, mesmo exercendo função vital no organismo humano, se em quantidades elevadas, leva a potenciais efeitos acumulativos ou tóxicos (1). O objetivo deste trabalho foi analisar os níveis de cobre em pontos variados da Estrada do Engenho.

Resultados e discussão

Foram coletadas onze amostras de sedimentos na região citada, conforme mostra a figura 1, com características diferentes entre si, exposição elevada a tráfego de veículos (P1), disposição irregular de resíduos doméstico e eletroeletrônicos (P2 a P7) e zona rural vegetação mais preservada (P8 a P11).



Figura 1. Locais de coleta de amostras de sedimentos.

As amostras foram secas a 60 °C pelo período de 48 horas. 2 g da fração granulométrica menor que 0,075 mm foram digeridas com 4 mL de água régia (3 HCl:1 HNO₃), 4 mL de água ultrapura Milli-Q e 1 mL de HClO₄, (3). Os extratos, filtrados e avolumados a 25,0 ml, foram lidos em um espectrômetro de absorção atômica, assim

como padrões e brancos. Os resultados são vistos na tabela 1.

Tabela 1. Níveis de cobre encontrados nos pontos de amostragem, em mg·Kg⁻¹ ± desvio padrão relativo em %.

P1	P2	P3	P4	P5	P6	P7	P8	P9	P10	P11
1,0	39,9	44,8	47,8	47,0	46,6	41,5	32,3	24,3	20,2	23,7
±22,5	±1,9	±2,9	±0,5	±2,8	±0,6	±3,8	±2,4	±5,9	±1,8	±2,6

Observa-se que os resultados os pontos P2 a P7 ultrapassa o limite de 35,7 mg·Kg⁻¹ estabelecido pelo CONAMA (2). Sendo que os níveis mais elevados encontram-se em P4 e P5, os mais próximos ao loteamento residencial e mais sujeitos ao descarte de resíduos. Verificou-se que as recuperações (para o material de referência certificado) e precisão (a partir dos RSDs%) foram aceitáveis de acordo com INMETRO (3). O limite de quantificação foi de 0,3 mg·Kg⁻¹ e de detecção 0,1 mg·Kg⁻¹, e as recuperação média foi 95,2%.

Conclusões

Foram encontrados níveis de cobre considerados tóxicos nos pontos mais próximos à zona residencial, o que evidencia um possível impacto nocivo à região, especialmente devido à proximidade da mesma com o canal São Gonçalo.

Agradecimentos

Agradecemos à PROPEP –IFSUL pela estrutura e financiamento.

Referencias e notas

- (1) Vaghetti, J. C. P. Utilização de biossorbentes para remediação de efluentes aquosos contaminados com íons metálicos UFRGS – Instituto de Química. 2009.
- (2) Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA). Resolução n° 454. 1° de novembro de 2012.
- (3) Instituto Nacional de Metrologia. Qualidade e Tecnologia (INMETRO). Orientação sobre validação de métodos analíticos. DÓQ-CGCRE-008. 2016.

Análise comparativa de métodos para a obtenção de Hidroxiapatita a partir das escamas da sardinha

Camilly Cristina Shmidt da Luz¹ (IC), Natacha Nilsen Biaotobock¹ (IC), Vanessa A. Matias² (TC) Albertina Xavier da Rosa Correa² (PQ), *e-mail cami.shmidtaluz@gmail.com

Laboratório de Química I, Univali¹, LaPeQ – Multiusuário, Univali².

Palavras Chave: Hidroxiapatita, Resíduo, Biomaterial, Enxerto ósseo.

Introdução

A pesca é um setor bastante expressivo no Brasil, e está em pleno crescimento. Nesse contexto, surge a possibilidade de utilizar a escama da Sardinha, um resíduo e fonte biogênica, para obter Hidroxiapatita ($\text{Ca}_{10}[\text{PO}_4]_6(\text{OH})_2$), rica em Cálcio e Fósforo (1,67), como demonstrado no diagrama abaixo (Figura 1).

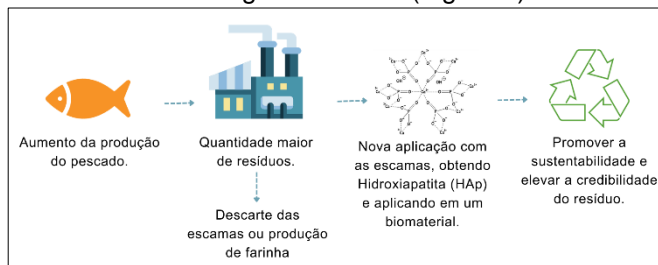


Figura 1. Diagrama ilustrativo sobre o reaproveitamento da escama para a obtenção de Hidroxiapatita.

Resultados e discussão

Os métodos de obtenção são apresentados na figura 2. Ademais, ressalta-se que o método A¹ não ocorreu o tratamento para remoção da proteína, outrossim, no método B² foi realizado o tratamento para desproteíntização. Quanto a caracterização por Espectrofotometria por Infravermelho com Transformada de Fourier - FTIR (Figura 3), as bandas típicas de HAp foram visualizadas em todos os tratamentos. Análises posteriores mostraram ausência de Nitrogênio total³ e óleos e graxas³ para ambos os métodos. As amostras apresentaram resultado médio de umidade³ de 0,19%, independentemente do tratamento.

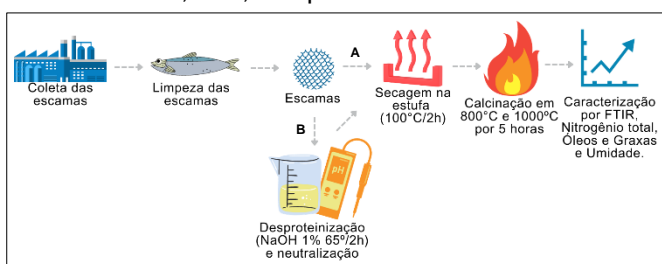
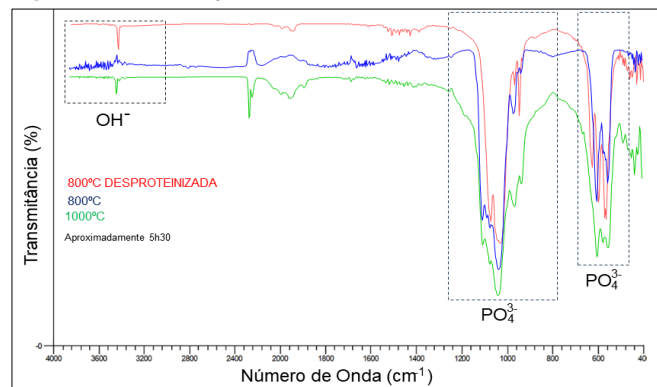


Figura 2. Diagrama das metodologias A e B, para obtenção da HAp.

Figura 3. Comparação do FTIR das amostras de HAp.



A Figura 4 apresenta o resultado para Fósforo total, determinado através do Método 4500-P E³. Ascorbid Acid Method, onde a amostra A de 800° apresentou cinzas após a calcinação, o que pode ter refletido a menor concentração de P em relação a amostra B 800°, não apresentando diferença significativa entre os métodos.

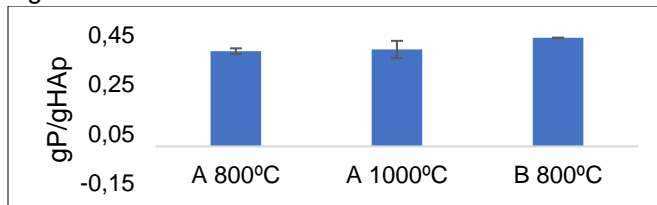


Figura 4. Análise de Fósforo total para os diferentes métodos.

Conclusões

- Escamas de sardinha como fonte de HAp:
- É viável em ambos os métodos de tratamento.
 - Não há necessidade de desproteíntização.

Referências e notas

- (1) Abdullah, N. H et al. Preparation and Characterization of Calcium Hydroxyphosphate (Hydroxyapatite) from Tilapia Fish Bones and Scales via Calcination Method. **2020**.
- (2) Ferreira, Daniel. Extração e Caracterização de Hidroxiapatita a partir de escamas de Peixe. Departamento de Engenharia Química e de Materiais. **2020**.
- (3) APHA, Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater – SMEWW. American Public Health Association – APHA, 23th ed. Washington. D. C. **2017**.

Identificação de nanopartículas de dióxido de silício em amostras de suco em pó por microscopia eletrônica de varredura

Jennefer Queiroz¹(IC)*, Edson Müller¹(PQ), Aline Müller¹ (PQ), Cristian Pereira¹(PG), Isadora Dornelles¹(IC).

*jennefer.queiroz@acad.ufsm.br

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria.

Palavras Chave: dióxido de silício, nanopartículas, antiaglomerante, alimento, microscopia eletrônica de varredura.

Introdução

Dióxido de silício (SiO₂) é muito utilizado na indústria alimentícia como agente antiemectante. O processo de produção desse aditivo alimentar pode gerar nanopartículas (NPs). Alguns estudos demonstram que NPs de SiO₂ apresentam potencial de toxicidade para as células humanas. Assim, é necessário o desenvolvimento de métodos analíticos para a identificação e caracterização de SiO₂-NPs em amostras alimentícias. Para isto, a etapa de preparo de amostra é indispensável, pois deve manter a integridade das NPs e garantir a estabilidade das mesmas em solução. O presente trabalho tem como objetivo avaliar o preparo de amostras para o isolamento e caracterização das SiO₂-NPs por microscopia eletrônica de varredura (MEV).

Resultados e discussão

A digestão por via úmida assistida por micro-ondas (MAWD) foi utilizada para promover a oxidação da matéria orgânica de amostras de suco em pó. Foram utilizados 250 mg de amostra e 6 mL de HNO₃ concentrado. Os digeridos foram filtrados com membrana de 15 nm e secos em estufa a 105 °C para posterior caracterização por MEV e espectrometria de raios-X por energia dispersiva (EDS).

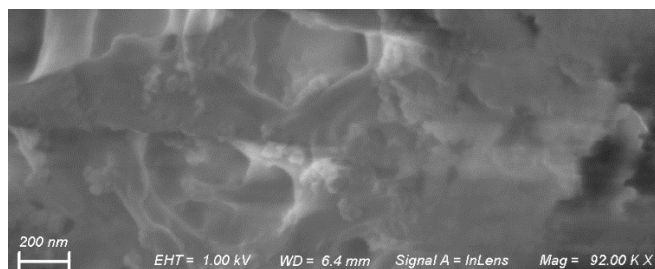


Figura 1. Imagem obtida por MEV utilizando o detector InLens. As imagens obtidas por MEV (Figura 1) e o espectro EDS (Figura 2B) confirmam a existência de partículas de SiO₂ com tamanho inferior a 100 nm. Entretanto, como

pode ser observado na Figura 2A, percebe-se que as partículas de SiO₂ estão aglomeradas, por consequência do preparo de amostra.

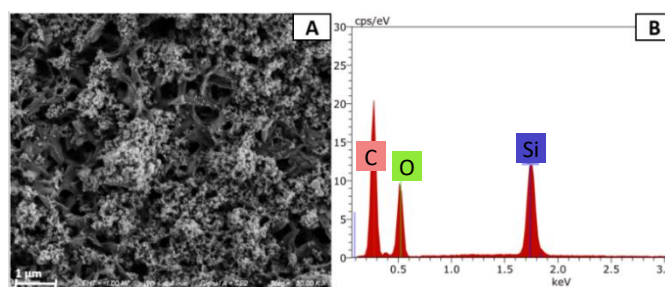


Figura 2. (A) Identificação de aglomerados de partículas com detector Everhart-Thornley e (B) espectro de EDS.

Conclusões

O preparo de amostra permitiu a oxidação dos compostos orgânicos presentes nas amostras e o isolamento das SiO₂-NPs. No entanto, é necessário desenvolver estratégias no preparo de amostras para minimizar a aglomeração das SiO₂-NPs. Serão realizadas avaliações futuras para a utilização da ICP-MS para a determinação da concentração das SiO₂-NPs nas amostras de suco em pó.

Agradecimentos

Agradeço ao LAQIA/UFSM, onde o trabalho foi realizado e ao CNPq pelo suporte financeiro.

Referências e notas

- (1) Kwon, R.; Kim, S.; Youn, S.; Choi, S. Fate Determination and Characterization of Food Additive Silicon Dioxide and Titanium Dioxide in Commercial Foods. *Front. Biosci. (Landmark Ed)* **2023**, 28(2), 36.

Determinação de metais em creme de leite por espectrometria de emissão óptica com plasma induzido por micro-ondas

Karine Flores Vilke (IC)^{1*}, Nicolle L. Bandeira (IC)¹, Yasmin Ribeiro Bloedorn (PG)¹, Jéssica da Rosa Porto (PG)¹, Charlie Guimarães Gomes (PG)¹, Anderson Schwingel Ribeiro (PQ)¹, Adriane Medeiros Nunes (PQ)¹

¹Universidade Federal de Pelotas, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Capão do Leão, RS, Brasil, 96160-000.

*e-mail: karinevilke41@gmail.com

Palavras-Chave: Creme de leite, Metais, MIP OES.

Introdução

Creme de leite é um produto lácteo frequentemente utilizado em receitas culinárias, sendo evidente a necessidade de desenvolver estudos sobre sua composição elementar, visto que esse produto pode ser fonte de minerais essenciais à saúde. Estes estudos podem também ajudar a garantir a segurança alimentar ao consumidor, já que este alimento é vendido em embalagens diversificadas, as quais podem causar a contaminação ao alimento se sofrerem qualquer tipo de dano durante o transporte ou armazenamento.

No entanto, como as amostras de creme de leite tradicionais são de difíceis decomposição devido ao elevado teor de gordura, variando de 20 a 49,9%, o objetivo deste estudo foi o desenvolvimento de um método baseado principalmente na etapa de preparo da amostra, onde foi utilizado um sistema aberto de decomposição ácida adaptado a um sistema de refluxo, para posterior determinação de Al, Fe, Mn e Zn por espectrometria de emissão óptica com plasma induzido por micro-ondas (MIP OES).

Resultados e discussão

Para o preparo das amostras, pesou-se 1 g da amostra diretamente nos tubos de digestão e adicionou-se 5 mL de HNO₃ 65%. Após, acoplou-se o sistema de refluxo e foi encaminhado ao bloco digestor a 200°C por 120 min. Depois adicionou-se 1,8 mL de H₂O₂ e retornou ao bloco por mais 30 minutos a 120°C. Posteriormente, as amostras foram avolumadas a 15 mL com água deionizada e filtradas para análise.

Na Tabela 1 estão apresentados os resultados das concentrações totais para os analitos em estudo.

Tabela 1. Resultados da concentração total de metais em amostra de creme de leite.

Elementos	Amostras (mg kg ⁻¹)		
	A	B	C
Al	10,42 ± 0,01	4,93 ± 0,45	179,95 ± 4,61
Fe	<LD	<LD	2,20 ± 0,04
Mn	1,99 ± 0,16	0,66 ± 0,05	0,73 ± 0,01
Zn	4,99 ± 0,02	9,33 ± 0,09	9,25 ± 0,79

Média ± desvio padrão

É possível observar na Tabela 1, que para o elemento Al, a amostra C apresenta concentração muito superior quando comparada as demais amostras. Já para o Fe, as amostras A e B apresentaram concentrações abaixo do limite de detecção, porém somente a amostra C, que obteve resultado para este analito. Para o Mn, alcançou-se melhor resultado para a amostra A, com a concentração de 1,99 mg kg⁻¹, sendo que as demais amostras apresentaram menores concentrações.

Por fim, para o Zn concentrações similares foram verificadas para as amostras B e C, 9,33 e 9,25 mg kg⁻¹ respectivamente. Conforme a literatura, cada pessoa saudável necessita de uma ingestão diária de 14 mg para Fe, 2,3 mg para Mn, 7 mg para Zn e 30 mg de Al^{2,3}.

Conclusões

O método desenvolvido baseado na de decomposição ácida em sistema aberto utilizando o sistema de refluxo, mostrou-se eficiente para o preparo das amostras, permitindo a determinação de metais em amostras de creme de leite pela técnica de MIP OES garantindo resultados exatos e precisos.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, INCTAA.

Referencias e notas

- (1) PEREIRA, C. C.; VITOLA, H. R. S.; DE SOUZA, A. O.; MEDINA, A. L.; GULARTE, M. A.; RIBEIRO, A. S. *Microchemical journal*, **2016**, 129,293.
- (2) BRASIL. *Diário Oficial da União*, **2006**. Brasília, DF.
- (3) LÓPES, F. F.; CABRERA, C.; LOURENÇO M. L.; LOPES, M.C. *Journal of Food Science*, **2000**, 65,2, 206.

Avaliação de um método de preparo de amostras para a decomposição de azeite de oliva e determinação de elementos terras raras por USN-ICP-MS

Camila A. André¹ (IC), Bruno Oliveira Poletto¹ (PG); Vanessa R. Nascimento¹ (PG), Cezar A. Bizzi¹ (PQ), Erico M. M. Flores¹ (PQ), Jussiane S. Silva^{1*} (PQ). *jussiane.silva@ufsm.br

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, RS, Brasil, 97105-900

Palavras-chave: Azeite de Oliva, Preparo de Amostras, Elementos Terras Raras, Autenticidade.

Introdução

O azeite de oliva consiste em misturas de triacilgliceróis com valores próximos a 99% (m/m). Esse óleo vegetal é de significativa importância comercial e é renomado pelas suas propriedades sensoriais e benefícios à saúde. Contudo, sua integridade pode ser comprometida por práticas adulterantes, tais como a mistura com azeites de qualidade inferior ou de procedência desconhecida. Regulamentações estabelecidas pela *International Olive Council*¹, *Codex Alimentarius*² e Agência Nacional de Vigilância Sanitária (ANVISA, Resolução nº 270/2005)³ definem padrões para a classificação e qualidade do azeite. Uma abordagem emergente que está sendo estudada para assegurar a autenticidade deste produto envolve o monitoramento da presença de oligoelementos, em particular os elementos terras raras (REE). No entanto, os REE estão presentes em concentrações extremamente baixas (na ordem de ng g⁻¹), exigindo métodos analíticos altamente sensíveis e com baixos limites de quantificação (LOQs). Neste contexto, o presente trabalho tem como objetivo desenvolver um método de preparo de amostras para possibilitar a decomposição de uma elevada massa de azeite utilizando um sistema de câmara única de reação (SRC-UltraWave™), seguida da determinação dos REE por espectrometria de massa com plasma indutivamente acoplado (ICP-MS) e nebulizador ultrassônico (USN).

Resultados e discussão

Inicialmente, considerando a dificuldade na determinação dos REE devido às interferências espectrais e baixas concentrações dos elementos no azeite, foi avaliada a eficácia na decomposição de massas de amostra entre 1 e 2 g. O programa de irradiação foi otimizado e a eficiência da decomposição foi avaliada pela determinação do carbono orgânico dissolvido (DOC) e acidez residual (RA). Devido à complexidade da amostra de azeite, como a presença de compostos orgânicos de difícil decomposição, destacando-se o ácido linoleico, foi necessário o uso de

6 mL de HNO₃ 14,4 mol L⁻¹. O método de decomposição por via úmida assistida por radiação micro-ondas (MAWD) em SRC otimizado permitiu a decomposição de até 2 g de azeite, sem causar a projeção da amostra, utilizando as seguintes condições: (i) 5 minutos de rampa até 115 °C; (ii) 50 minutos de rampa até 180 °C; (iii) 10 minutos de rampa até 270 °C, e permanência por 20 minutos em 270 °C. Posteriormente, foram avaliadas diferentes massas de azeite e volume de HNO₃ 14,4 mol L⁻¹. As condições ótimas foram obtidas com 1 g de azeite e 8 mL de HNO₃ 14,4 mol L⁻¹, resultando em valores de DOC e RA de 129 mg L⁻¹ e 7%, respectivamente. A exatidão do método MAWD-SRC foi avaliada pela adição de solução de referência de REE nas amostras antes da decomposição, obtendo recuperação entre 90% e 107%. O método proposto foi aplicado a amostras de azeites de diferentes origens geográficas, e os resultados para REE variaram entre 9,80 (Ce) e 0,200 (Ho) ng g⁻¹.

Conclusões

O método desenvolvido utilizando o sistema MAWD-SRC provou ser eficaz na decomposição de uma elevada massa de azeite (1 g), permitindo baixos LOQs de 0,01 a 0,7 ng g⁻¹ para REE. Esse método representa uma ferramenta promissora para estudos de autenticidade do azeite, possibilitando a quantificação de um vasto conjunto de REE em baixas concentrações.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq, a CAPES e a FAPERGS pelo suporte financeiro.

Referências

- (1) BRASIL. Ministério da Saúde, Agência Nacional de Vigilância Sanitária. Resolução RDC nº 270, de Set. de 2005.
- (2) INTERNATIONAL OLIVE COUNCIL. COI/T.15/NC no 3/Rev. 6, 2011.
- (3) CODEX ALIMENTARIUS, Food and Agriculture Organization of the United Nations, 2022.

Determinação da concentração total de Ba, Cu, K e Mn em hambúrgueres processados por Espectrometria de emissão óptica com plasma induzido por micro-ondas (MIP OES)

*Nicolle Lima Bandeira (IC)¹, Jéssica da Rosa Porto (PG)¹, Yasmin Ribeiro Bloedorn (PG)¹, Daisa Hakbart Bonemann (PG)¹, Charlie Guimarães Gomes (PG)¹, Anderson Schwingel Ribeiro (PQ)¹.

*niicolle.lima97@gmail.com

¹Universidade Federal de Pelotas, Capão do Leão, RS, Brasil- CEP 96160-000.

Palavras-Chave: Hambúrgueres processados, Minerais, MIP-OES.

Introdução

As carnes processadas surgiram para facilitar o armazenamento e aumentar a validade do alimento, além de manter sua cor e sabor. Atualmente são muito consumidas por sua praticidade e por possuir um valor comercial mais acessível quando comparado com a carne animal *in natura*.¹

Devido ao alto consumo de carnes processadas pela população, faz-se necessário determinar os constituintes desses alimentos, entre eles os metais essenciais e não essenciais, uma vez que trazem benefícios e malefícios dependendo do tipo e da quantidade. Para determinar a concentração dos metais, algumas técnicas analíticas são utilizadas. Dentre as técnicas, a Espectrometria de emissão óptica com plasma induzido por micro-ondas (MIP OES) é uma excelente opção por se tratar de uma técnica multielementar e econômica, devido ao plasma gerado pelo gás nitrogênio capturado da atmosfera.² Sendo assim, o presente estudo tem como objetivo determinar a concentração de Ba, Cu, Mn e K por MIP OES em amostras de hambúrgueres processados.

Resultados e discussão

Foram adquiridas três amostras de hambúrgueres industrializados no comércio de Pelotas/RS, as quais foram homogeneizadas com o auxílio de um mixer e armazenadas em frascos de polipropileno (PP) até o momento das análises. Para etapa de digestão, foi pesado 1 g de amostra e adicionado 5 mL de HNO₃ e levado ao bloco digestor com sistema de refluxo acoplado por 187 minutos a 140 °C. Logo após, foram resfriadas a temperatura ambiente para realizar a adição de 1,8 mL de H₂O₂ e colocadas no bloco novamente por mais 1 hora. Posteriormente, foram avolumadas a 20 mL com água desionizada e filtradas para serem analisadas.

As amostras A, B e C apresentaram baixas concentrações de Ba: 0,55, 0,39 e 0,52 mg/kg respectivamente. A amostra A não somente apresentou a maior quantidade de Ba, como também de Cu (3,14

mg/kg) e K (2421 mg/kg), sendo que para o Cu a concentração triplicou quando comparado com a amostra C (1,08 mg/kg). Já a amostra C foi a que apresentou maior quantidade de Mn (1,84 mg/kg), seguido da amostra A (1,19 mg/kg) e B (0,80 mg/kg). Considerando que o valor de ingestão diária recomendada (IDR) para adultos de Ba, Cu, K e Mn é 0,14 mg/massa corpórea, entre 0,3 e 0,9 mg/dia, 3500 mg/dia e 2,3 mg/dia respectivamente, e o consumo de 100 g de hambúrguer por dia, pode-se concluir que as amostras contribuem para a ingestão desses elementos sem ultrapassar os valores recomendados.

Tabela 1. Concentrações de Ba, Cu, Mn e K em três amostras de hambúrgueres processados (n=3)

Analito	Concentração total, X ± SD (mg kg ⁻¹)		
	A	B	C
Ba	0,55 ± 0,07	0,39 ± 0,01	0,52 ± 0,05
Cu	3,14 ± 0,31	1,74 ± 0,12	1,08 ± 0,09
Mn	1,19 ± 0,13	0,80 ± 0,05	1,84 ± 0,08
K	2421 ± 70	2354 ± 147	2241 ± 220

Conclusões

O método utilizado no preparo de amostras para a determinação da concentração total em hambúrgueres processados foi eficiente. As concentrações obtidas não apresentam riscos para o consumo do alimento.

Agradecimentos

CAPES, CNPq e INCTAA.

Referências e notas

- (1) ROHRMANN, Sabine. **Processed meat: the real villain?**. Proceedings of the Nutrition Society, Publicada online por Cambridge University Press, 75, 4, p. 233–241, Abril, 2016.
- (2) BONEMANN, D. H.; LUCKOW, A. C. B.; PEREIRA, C. C.; DE SOUZA, A. O.; CADORE, S.; NUNES, A. M.; VIEIRA, M. A.; RIBEIRO, A. S. *Journal of Food Composition and Analysis*, 96, 103716.

ESTUDO DA DISTRIBUIÇÃO DE CÁDMIO E COBALTO EM FRAÇÕES DE ÁGUAS ESTUARINAS EMPREGANDO VOLTAMETRIA DE REDISSOLUÇÃO

Kasley Barreto¹ (IC)*; Leandro Machado de Carvalho¹ (PQ); Cristina Ramos Trindade¹ (PG).
kasleybarreto@hotmail.com

¹LACHEM, Departamento de Química Universidade de Federal de Santa Maria.

Palavras-Chave: Voltametria de redissolução, Metais, Mineração, Águas estuarinas.

Introdução

Os processos industriais, como o refino de minério, podem interferir na qualidade do ecossistema aquático levando a efeitos prejudiciais devido à mobilização de metais potencialmente tóxicos que interagem com o meio ambiente. Neste trabalho, avaliou-se a distribuição dos metais cádmio (Cd) e cobalto (Co) nas frações solúvel (<0.22 µm) e particulada (>0.22 µm) em águas superficiais coletadas próximas à região de mineração às margens do estuário do rio Pará (Belém-PA).

Resultados e discussão

As amostras foram coletadas em triplicata de 52 pontos de amostragem e analisadas em relação à concentração total (decomposta em reator UV com lâmpada de mercúrio 250 W) e nas frações: (1) total dissolvida (filtradas em membrana de 0.22 µm e decompostas em reator UV com lâmpada de mercúrio de 250W) e (2) reativa dissolvida (filtradas em membrana <0.22 µm) dos metais em estudo. A fração denominada reativa dissolvida compreende o elemento na sua forma lábil e eletroquimicamente reativo, livre para reagir com a superfície polarizada do eletrodo. A determinação de Cd nas frações total foi realizada por voltametria de redissolução anódica (ASV), utilizando tampão acetato de amônio (pH 4,6) como eletrólito suporte. A análise sequencial de Co foi realizada por voltametria adsorviva de redissolução catódica (AdCSV), utilizando dimetilglioxima (DMG) como agente complexante em tampão amônio (pH 9,5) como eletrólito suporte. Os voltamogramas de pulso diferencial foram registrados utilizando-se um potenciostato 693 VA Processor acoplado ao VA Stand 694 (Metrohm AG). As medidas voltamétricas foram realizadas empregando o eletrodo de mercúrio de gota pendente (HMDE) como eletrodo de trabalho, Ag/AgCl (KCl 3 mol/L) como eletrodo de referência e eletrodo de platina como contra-eletrodo. Os parâmetros eletroquímicos da medida voltamétrica foram os seguintes: potencial de deposição -1150 mV,

tempo de deposição 90 s, velocidade de varredura 50 mV/s, amplitude de pulso 50 mV. As concentrações dos elementos foram determinadas pelo método da adição do padrão (n=3). Para o elemento Cd, as frações de água total dissolvida variaram em concentração na faixa de 0,0021 a 0,66 µg/L. Para as frações denominadas “reativa dissolvida”, as concentrações do elemento Cd variaram de 0,01 a 1,35 µg/L. Para Cd total, o mínimo e máximo quantificado nas amostras foi de 0,17 e 2,23 µg/L, respectivamente. Com relação à distribuição de Cd na fração reativa, observou-se que a distribuição relativa deste elemento variou de 1,43 a 99,53% da fração total dissolvida. Para Co, as concentrações na fração total dissolvida variaram de 0,012 a 3,79 µg/L. Já na fração reativa dissolvida, as concentrações variaram de 8,7 a 254,37 ng/L. Por fim, observou-se que as concentrações de Co total variaram de 0,013 a 3,84 µg/L nas amostras estudadas. Com relação à distribuição de Co na fração reativa, observou-se que a distribuição relativa deste elemento variou de 0,67 a 95,07% da fração total dissolvida.

Conclusões

A perspectiva futura do trabalho é incluir a determinação de Tálcio nas frações dissolvido, total e reativo dissolvido. E com isso compreender como acontece a mobilização dos metais em estudo bem como compreender como os períodos de seca, transição e chuvoso influenciam na concentração desses metais.

Agradecimentos

LACHEM, CNPq, CAPES, FUNDEP

Referencias e notas

- (1) de Carvalho, L. M., Hollister, A. P., Trindade, C., Gledhill, M., & Koschinsky, A. Marine Chemistry, **2021**, 236, 104019

DETERMINAÇÃO DE HALOGÊNIOS E ENXOFRE EM AMOSTRAS DE CHÁ

Larissa C. A. Costa (PG)*, Maria Eduarda B. Kruger (G), Filipe S. Rondan (PQ)¹, Jenifer H. Cerqueira (PG)¹, Marcia F. Mesko (PQ)¹ *cristine.andradec@gmail.com

¹Universidade Federal de Pelotas – UFPel

Palavras Chave: Chás, Preparo de Amostras, Halogênios, Combustão Iniciada por Micro-ondas, Cromatografia de Íons.

Introdução

A utilização de diferentes tipos de chás para a prevenção de doenças tem sido crescente. Estas plantas apresentam diversos constituintes em sua composição, incluindo os compostos halogenados e sulfurados que podem estar presentes de forma natural ou oriundos de atividades antropogênicas. Entre as técnicas analíticas mais utilizadas para a determinação da concentração de halogênios e enxofre em amostras variadas, pode-se citar a cromatografia de íons utilizando detecção por condutividade (IC-CD).¹ Porém, anterior a essa etapa é necessário planejar uma etapa de preparo da amostra para obter uma solução compatível com a técnica de determinação.² Portanto, a combustão iniciada por micro-ondas (MIC) tem sido uma alternativa, visando a determinação de halogênios. Sendo assim, o objetivo deste trabalho foi determinar a concentração de halogênios e enxofre em chás, utilizando a MIC como método de preparo e a IC-CD com técnica de determinação.

Resultados e discussão

Foram analisados 5 tipos de chás: chá de boldo, capim-cidreira, hortelã, preto e verde. As amostras industrializadas de chás (caixas com 13 sachês) foram obtidas no comércio local de Pelotas/RS. Após o desenvolvimento do método, as seguintes condições foram aplicadas para análise das amostras: foram utilizados 900 mg de chá na forma de comprimidos, estes foram dispostos sobre suportes de quartzo, com disco de papel filtro contendo 50 µL de NH₄NO₃ 6 mol L⁻¹, os quais foram inseridos em frascos de quartzo contendo 6 mL de solução absorvedora (NH₄OH 100 mmol L⁻¹). Os frascos foram fechados, fixados ao rotor, pressurizados com 20 bar de O₂, inseridos no forno micro-ondas e submetidos a um programa de irradiação. Após, as amostras foram coletadas, filtradas, diluídas e analisadas por IC-CD.

Tabela 1. Concentração (mg kg⁻¹) de halogênios e enxofre obtidas nas amostras avaliadas (média ± desvio-padrão, n=3).

Tipo de chás	Cl	S	F
Boldo	2420 ± 59	786 ± 15	<9*
Erva-cidreira	4243 ± 84	1100 ± 24	<9*
Hortelã	6961 ± 64	4023 ± 62	<9*
Verde	549 ± 24	2530 ± 76	223 ± 4
Preto	557 ± 9	2605 ± 10	828 ± 6

LOQ

As concentrações dos analitos variam em uma ampla faixa, e devido aos valores para flúor nos chás verde e preto, foi realizada a análise das infusões para avaliar a lixiviação dos analitos para a bebida. Nas amostras de chá verde e chá preto foram lixiviados cerca de 88 e 97% de flúor, respectivamente, para os outros tipos de chás não foi possível realizar a avaliação. Para cloro, as porcentagens lixiviadas variaram de 73 a 94%, e para enxofre, foram de 81 a 84% em todos os tipos de chás analisados. Com esta análise foi possível constatar que na fração lixiviada estão presentes as espécies Cl⁻, SO₄²⁻ e F⁻, tendo em vista que esta é a forma química detectada pela técnica de determinação proposta por esse trabalho, a IC-CD.

Conclusões

Usando o método proposto foi possível determinar F, Cl e S em chás, e observar que as concentrações variam em uma ampla faixa. Além disso, é possível inferir que cerca de 70 a 90% das espécies lixiviadas dos chás estão na forma de Cl⁻, SO₄²⁻ e F⁻, ressaltando a relevância de estudos de análise de especiação para a fornecer informações sobre as outras espécies, tendo em vista que estes produtos são amplamente consumidos.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPERGS e INCT-Bioanalítica

Referencias e notas

- (1) MESKO, M. F., et al. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 6475 – 6484, 2020.
 (2) FLORES, E. M. M., et al., *Analytical Chemistry*, 3525 – 3529, 2004.

Avaliação da concentração de elementos potencialmente tóxicos em fluidos utilizados na perfuração de poços de petróleo por ICP-MS

Thiago Laurentino Rial (IC)^{1*}, Eduardo S. Chaves (PQ)¹

*thiago.rial@ufsc.br

¹ Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil.

Introdução

As indústrias de óleo e gás têm grande relevância econômica, pois é responsável uma diversidade de produtos comercializáveis, pois esta gera uma quantidade expressiva de resíduos.¹ Os resíduos gerados são provenientes de diferentes processos envolvidos nas etapas da indústria de petróleo, sendo eles lodos, águas residuais, sedimentos de tanques de armazenamento, borras oleosas, catalisadores, fluidos de perfuração e cascalhos de perfuração. Os fluidos de perfuração, à base de água e não aquosos, são utilizados em grande quantidade na indústria de óleo e gás, podem ser altamente poluentes.² A complexidade desses resíduos exige uma caracterização detalhada para garantir a sua destinação adequada, atendendo as regulamentações ambientais. Desta forma, a determinação de elementos potencialmente tóxicos em diferentes amostras de fluidos de perfuração por ICP-MS foi realizada.

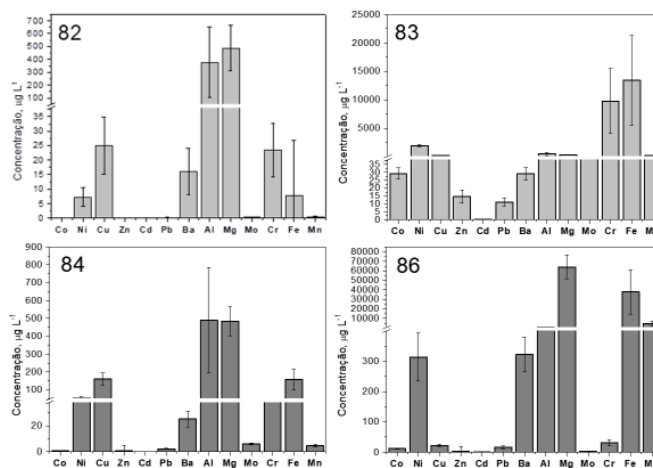
Resultados e discussão

Após a caracterização físico-química, onde foram determinados a porcentagem de água, óleo e o pH das amostras analisadas, estas foram decompostas por digestão ácida assistida por micro-ondas. Primeiramente, realizou-se uma análise quantitativa e com base nos resultados, os elementos Co, Ni, Cu, Zn, Cd, Pb, Ba, Al, Mg, Mo, Cr, Fe e Mn foram selecionados para posterior quantificação. A determinação dos elementos foi realizada por ICP-MS, utilizando curva de calibração externa com padrões aquosos (1,0 - 150,0 µg L⁻¹) e Rh (5 µg L⁻¹) como padrão interno. As curvas de calibração para os analitos apresentaram boa linearidade ($R^2 > 0,999$) e limites de detecção na ordem de µg L⁻¹. As concentrações obtidas para os diferentes analitos nas amostras de fluido analisadas (82, 83, 84 e 86) estão reunidos na Figura 1.

Considerando as amostras de fluidos analisadas, a concentração de elementos conhecidamente de alto

potencial tóxico, como Cd e Pb foram baixas, sendo estas menores que 0,2 e 15 µg L⁻¹, respectivamente.

Figura 1: Concentração elementos potencialmente tóxicos em fluido e perfuração.



De forma geral, a concentração dos elementos variou expressivamente entre as amostras de fluido analisadas. Entretanto, a presença de elementos potencialmente tóxicos em fluidos de perfuração é diretamente dependente do tipo de fluido utilizado e das características da rocha onde o poço está sendo perfurado.

Conclusões

Os resultados indicam uma grande variação nas concentrações dos elementos entre as amostras, reflexo da complexidade e das características da amostra de fluido. De forma geral a concentrações dos analitos variou entre µg L⁻¹ a mg L⁻¹.

Agradecimentos

À UFSC, LEMA e ao CNPq.

Referencias

- ALMEIDA, Jorge. FURG – CTI. Rio Grande, 2006.
- NJUGUNA, James, et. al., Waste Management, 139, 2022.

Análise elementar em patê industrializado de origem animal por MIP OES

Ana Paula M. de Oliveira (IC)^{1*}, Nicolle L. Bandeira (IC)¹, Jéssica da R. Porto (PG)¹, Yasmin R. Bloedorn (PG)¹, Daisa H. Bonemann (PG)¹, Charlie G. Gomes (PG)¹, Adriane M. Nunes (PQ)¹, André R. Fajardo (PQ)¹, Anderson S. Ribeiro (PQ)¹

¹Universidade Federal de Pelotas, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Capão do Leão, RS, Brasil, 96160-000.

*ap_marques@outlook.com

Palavras-Chave: Patê, Minerais, MIP-OES.

Introdução

As carnes são fontes de proteínas de alto valor biológico como lipídios, vitaminas e minerais essenciais para o consumo. O patê é um produto embutido pastoso e industrial feito a partir de ingredientes moídos ou triturados, geralmente à base de carne, peixe ou vegetais. É importante ressaltar que as carnes processadas em geral têm um alto índice de gordura e sódio, dessa forma quando consumida em excesso aumenta o risco à saúde devido a adição de produtos químicos e conservantes que esses alimentos são submetidos para manter a durabilidade e o frescor do alimento. Também é necessário o monitoramento da concentração de outros metais como Ba, Fe, Mg e Zn que também desempenham funções importantes no organismo e podem ser encontrados nos alimentos processado à base de carne¹. Sendo assim, o objetivo desse trabalho é determinar a concentração de Ba, Fe, Mg e Zn em amostras de patê por Espectrometria de emissão óptica com plasma induzindo por micro-ondas (MIP OES).

Resultados e discussão

Para este estudo foram adquiridas 3 amostras de patês de diferentes marcas (A, B e C), no comércio local de Pelotas/RS. Todas as amostras foram homogeneizadas, identificadas e armazenadas a -16°C até o momento das análises. Para o preparo das amostras, pesou-se 1 g diretamente nos tubos de digestão e adicionou-se 5 mL de HNO₃ 65%. Após, acoplou-se o sistema de refluxo e o sistema foi encaminhado ao bloco digestor a 140°C por 127 min. Posteriormente adicionou-se 1,8 mL de H₂O₂ 35% e retornou ao bloco por mais 60 min, ao final da decomposição as soluções foram avolumadas a 20 mL com água desionizada e filtradas para posterior análise. O Ba não é um elemento essencial ao ser humano, sua ingestão mesmo que em pequenas quantidades pode ser prejudicial à saúde. O valor máximo permitido para o Ba pela Portaria 518 do Ministério da Saúde é de 0,7 mg. A ingestão diária recomendada para adultos de Fe é de 14 mg, Mg é 260 e Zn referente a 7 mg. Os resultados obtidos através da

decomposição ácida de patês estão citados na Tabela 1.

Tabela 1. Concentrações obtidas por MIP OES em mg kg⁻¹ de Ba, Fe, Mg e Zn em amostras de patês industrializados.

Elementos	Amostras		
	A	B	C
Ba	0,52 ± 0,05	0,29 ± 0,02	30 ± 0,03
Fe	25,77 ± 2,52	6,72 ± 0,37	40,06 ± 2,85
Mg	119 ± 23	96 ± 0,3	134 ± 13
Zn	9,33 ± 2,11	6,66 ± 0,02	18,74 ± 1,64

Média ± desvio padrão

E assim, para que pudéssemos correlacionar a concentração obtida para os analitos com a ingestão diária recomendada, levamos em consideração a recomendação do Ministério da Saúde para o consumo de carne e absorção dos metais. Considerando o consumo de 50 g de patê por dia, pode-se concluir que as amostras contribuem para a ingestão desses elementos, porém sem ultrapassar os valores recomendados².

Conclusões

Conclui-se que o método de decomposição ácida proposta para o preparo de amostras de patês mostrou-se robusto e eficiente para a determinação dos elementos Ba, Fe, Mg e Zn através da técnica de MIP OES.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, INCTAA.

Referências e notas

- (1) COLMENERO, F. J.; SANTAOLALLA, J. C. Ministério de agricultura, pesca y alimentación, **1989**.
- (2) LESSA, M. Ministério da Saúde, **2017**.

Método de microextração simultânea baseado em solvente supramolecular de para determinação de pesticidas em amostras de águas e farinhas

Luciane Effting¹ (PG), César R. T. Tarley^{1,2*} (PQ)

¹ Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina (UEL), PR, Brasil

² Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia em Bioanálise (INCTBio), Instituto de Química, SP, Brasil
*tarley@uel.br

Palavras-Chave: solvente supramolecular, Microextração, Pesticidas, Amostras aquosas.

Introdução

Pesticidas são amplamente utilizados na agricultura para eliminar ou controlar pragas agrícolas que podem reduzir a produtividade, mas devido ao uso descontrolado têm sido lançados em matrizes ambientais, incluindo fontes de água doce, ou encontrados em alimentos, apresentando risco ao ecossistema e aos seres humanos. Assim, tornou-se essencial desenvolver métodos analíticos sensíveis, rápidos e ambientalmente amigáveis para determinação de pesticidas em amostras de águas e alimentos, sendo a preparação da amostra a parte mais crucial do processo analítico, devido às baixas concentrações dos analitos. Solventes supramoleculares (SUPRASs) são solventes não voláteis e não inflamáveis com propriedades ajustáveis que podem ser alteradas facilmente pela variação dos grupos hidrofóbicos ou polares do anfífilico e são usados como solventes de extração alternativos aos solventes tradicionais¹. Neste trabalho, cinco pesticidas de diferentes classes, clorantniliprole, cresoxim-metílico, procloraz (uso não permitido), propanil, trifluralina foram pré-concentrados com solvente supramolecular e quantificados por HPLC-DAD para a aplicação em amostras de águas e farinhas.

Resultados e discussão

Para obter as melhores condições de microextração supramolecular as variáveis foram avaliadas univariadamente e obteve-se as condições que favorecem a máxima extração de todos os analitos simultaneamente. O pH da solução aquosa dos pesticidas favorece a pré-concentração dos analitos quando as moléculas de pesticidas estão em sua forma neutra e obteve-se o pH 6,0 ajustado com tampão BR 0,01 mol L⁻¹ como o melhor para o processo de microextração. O decanol é o anfífilico responsável pela extração dos pesticidas e a quantidade usada é importante para obtenção de um alto fator de pré-concentração sem perder a eficiência analítica, que foi

obtido com 75 µL. O THF é responsável por dispersar os anfífilicos na solução da amostra e promover sua automontagem, para isso, 400 µL foram eficientes. A adição de 4% m/v de NaCl diminuiu a solubilidade dos analitos em solução aquosa, devido ao efeito *salting-out*. A agitação em vortex e a centrifugação são necessárias para a aceleração da transferência de massa dos pesticidas para o extrator e subsequente separação de fases, obteve-se 120 s como o melhor tempo de vortex e 120 s como tempo de centrifugação. A ferramenta AGREE considerou o método “verde”, com uma nota geral de 0,64. Com todas as variáveis otimizadas, a eficiência da microextração supramolecular foi avaliada com o cálculo das figuras de mérito dos pesticidas pré-concentrando 10 mL da solução aquosa. Os valores de linearidade demonstraram uma ampla faixa de trabalho e as equações lineares apresentam um coeficiente de correlação maior que 0,99. Destacam-se os valores obtidos como limite de quantificação, entre 1,3 e 27,3 µg L⁻¹, e os altos valores de pré-concentração, na faixa de 50,1 a 90,3 vezes que possibilitaram a aplicação do método em amostras de águas de dois lagos. um riacho e três amostras de farinhas (trigo, aveia e arroz) onde não foi encontrado nenhum resíduo dos pesticidas. As recuperações obtidas, na faixa de 81 a 111%, permitem inferir que o método não sofre com possíveis interferências de componentes da matriz.

Conclusões

O método de microextração supramolecular mostrou eficiência na pré-concentração dos cinco pesticidas. Além disso, este método não necessita de etapa limpeza e consome baixíssimos volumes de solventes orgânicos (475 µL de 1-decanol e THF), o que demonstra o comportamento ecologicamente correto deste método, atestado pela ferramenta AGREE.

Agradecimentos

UEL, INCTBio, Capes e CNPq.

Referências e notas

(1) RUBIO, Soledad. Analytical and Bioanalytical Chemistry, v. 412, n. 24, p. 6037-6058, 2020.

Análise termogravimétrica do caroço de pêssego

Kowalski, Erika R. S.¹ (IC)*; Castro, Fábio P. S.¹ (PG); Timm, Élita H.¹ (PG); Sanches Filho, Pedro J.² (PQ); Barwald, Giani M. B.² (PQ)

¹ Instituto Federal de educação, ciência e tecnologia Sul-rio-grandense, Câmpus Pelotas, Brasil. erikakowalski72@gmail.com

Palavras Chave: Caroço, Pêssego, Pirólise, Química analítica, Química Verde, Termogravimetria.

Introdução

A análise termogravimétrica (ATG) tem como objetivo determinar faixas de temperatura onde passam a ocorrer perdas de massa do produto, determinando assim, as melhores condições para realização do posterior processo de pirólise.

Logo, o objetivo deste trabalho é determinar as melhores condições de temperatura para pirólise (PI) em caroço de pêssego (CP).

Resultados e discussão

As análises termogravimétricas foram realizadas em um equipamento do tipo analisador elementar, modelo Netzsch STA 449 F3 JUPITER, com 30°C/ 20.0(k/min)/ 900°C, forno SiC S e faixa de fluxo de 50.0 mL/min.

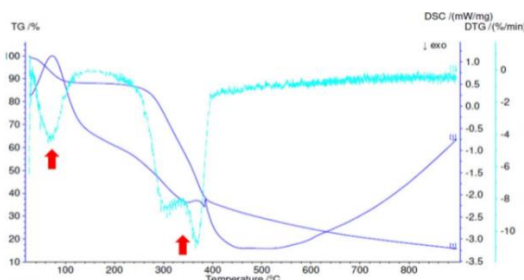


Figura 1. Perfil Termogravimétrico de CP

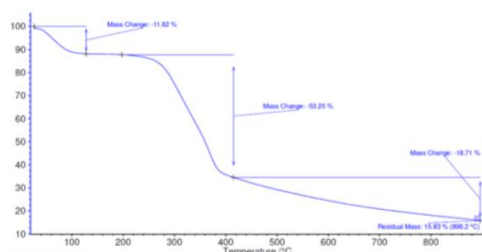


Figura 2. Perfil da análise termogravimétrica da biomassa do endocarpo de caroço de pêssego.

Na figura 2 nota-se que a temperatura em torno de 140°C decompõe cerca de 11,82% da amostra. Enquanto que em 400°C, decompõe +60% por conta da alta quantidade de compostos voláteis. Logo, quando a temperatura atingiu 895°C, 18,17% da amostra foi termicamente decomposta.

Tabela 1. Análise imediata da amostra de CP, (%±%RSD)

UMIDADE	VOLÁTEIS	CINZAS	CARBONO FIXO
11,59±0,5	67,20±2,1	18,51±7,2	2,71±8,0

Conclusões

Conclui-se que a cerca de 140°C obtêm-se uma pequena perda de massa que é referente à umidade. Em seguida, aos 400°C perde-se compostos orgânicos livres de menor peso molecular presentes, o que gera uma perda significativa da massa da amostra por conter uma grande quantidade de voláteis. Atinge-se decomposição completa ao atingir a temperatura de 895°C. Assim, pode-se estabelecer que entre 450°C a 550°C obtêm-se bio-óleo pesado e carvão, por possuírem valores de poder calorífico superior bem próximos.

Agradecimentos

Ao GPCA e ao IFSUL/PROPESP/BIC pela bolsa concedida.

Referências e notas

- (1) HOLMAN J.P Experimental Methods for Engineers. McGraw-Hill, New York, **1994**, 616p.
- (2) VALADÃO, et al. Estudo comparativo dos bio-óleos obtidos por pirólises rápida e lenta do caroço de pêssego. Eng Sanit Ambient | v.26 n.4 | jul/ago 2021 | 757-764.
- (3) ABNT. Associação Brasileira de Normas Técnicas. Carvão mineral – Determinação do teor de cinzas. NBR8289 (MB1891), 1983.

Avaliação Forense da Falsificação de Medicamentos Suplementares à base de Ferro através da Espectrometria de Absorção Molecular na Região do Ultravioleta e Visível

Jhulyana Campos Cardoso (IC)*, Taina Fernanda Barbosa Nunes (IC), Carla Andrade Hartwig (PQ), Diogo La Rosa Novo (PQ)**.

Centro de Ciências, Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas/RS, Brasil.

**jucampx@gmail.com; **diogo.la.rosa@hotmail.com*

Palavras Chave: Perícia forense, Controle de qualidade, Sulfato ferroso, Ferro, UV-Vis.

Introdução

A deficiência de ferro e doenças relacionadas, como a anemia, são consideradas problemas de saúde pública no Brasil. Na esfera mundial é vista como uma das deficiências minerais mais recorrentes¹. A anemia afeta 43% das crianças, 38% das gestantes e 29% das mulheres não grávidas mundialmente¹. O tratamento apropriado para deficiência de ferro muitas vezes é a correção da causa do diagnóstico, juntamente ao ajuste da dieta alimentar acompanhada da suplementação oral por meio de sais férricos, como o sulfato ferroso, encontrado em variadas formas, como gotas, flaconetes e comprimidos. Entretanto, o controle da concentração de ferro nesses medicamentos suplementares é indispensável, visto que são medicamentos acessíveis e de fácil aquisição no mercado. Esses fatores aumentam a necessidade do controle de qualidade em relação à dosagem pela falsificação das informações no rótulo¹. Nesse sentido, na determinação da concentração de ferro em amostras de medicamentos pode-se utilizar a espectrometria de absorção molecular na região do ultravioleta e visível (UV-Vis). Essa é uma técnica simples e de baixo custo quando comparada a outras técnicas analíticas². Dessa maneira, o trabalho objetivo avaliar a determinação espectrofotométrica de ferro em medicamentos suplementares comerciais de sulfato ferroso via análise direta e a avaliação dessa ferramenta analítica para análise de rotina.

Resultados e discussão

Para a realização dos experimentos como avaliação do comprimento de onda mais adequado, preparo da curva de calibração e ensaio de recuperação foi utilizada uma solução padrão de 50 mg/L de Fe²⁺. A solução final utilizada para a determinação de Fe²⁺ por UV-Vis consistiu na mistura da amostra ou solução padrão com ácido ascórbico (800 µL de 1%, m/v), fenantrolina (400 µL de 0,25%, m/v) e tampão acetato de sódio/ácido acético (2 mL de 2 mol L⁻¹, pH ~ 4,7) avolumadas a 10 mL. Para a avaliação da técnica de determinação, foi feita uma varredura espectral na região de 400 nm até

600 nm com a solução de 5 mg/L de Fe²⁺ com o intuito de observar o comprimento de onda com o maior sinal de absorbância. O valor selecionado foi de 510 nm. Após, foi avaliada a concentração mínima de Fe²⁺ que poderia ser determinada através da construção de uma curva de calibração. A faixa de trabalho estabelecida foi de 0,50 mg/L até 5,0 mg/L, apresentando um coeficiente de correlação de 0,9886. O limite de quantificação foi de 0,5 mg/L. Uma amostra em gotas contendo 125 mg/mL de sulfato ferroso foi diluída e analisada em triplicata. A concentração de Fe²⁺ encontrada na amostra foi de 46217 ± 421 mg/L, concordando em cerca de 100% com o valor indicado no rótulo do produto de cerca de 46000 mg/L de Fe²⁺. Esse resultado indica a coerência da dosagem da amostra analisada. A exatidão da técnica utilizada foi avaliada através de ensaios de recuperação. A amostra foi diluída 20000 vezes e a concentração de Fe²⁺ de 2,2 mg/L foi acrescida de mais 2,0 mg/L de Fe²⁺. O resultado encontrado foi de 4,1 mg/L. Esse ensaio representa a adição de 100% da concentração previamente determinada e a recuperação foi de 94%. Assim, os resultados indicam uma adequada exatidão e precisão do método proposto.

Conclusões

Com base nos experimentos realizados é possível concluir que foi viável quantificar o teor de ferro no medicamento suplementar analisado utilizando a espectrofotometria na região do UV-Vis. O medicamento analisado apresentou coerência dos resultados com o rótulo do produto. Outras análises serão realizadas em medicamentos similares para avaliar a falsificação dos produtos e aprofundar a aplicação do método.

Agradecimentos

À UFPel e à Comissão Organizadora do SBQSul.

Referencias e notas

- (1) WHO guideline on use of ferritin concentrations to assess iron status in individuals and populations. Geneva: World Health Organization; 2020. Licence: CC BY-NC-SA 3.0 IGO.
- (2) Holler, F. J.; Skoog, D. A.; Crouch, S. R.; Princípios de análise instrumental, 6ª ed., Bookman, 2009.

ANA 088

Determinação de níquel em suspensões de cacau em pó por espectrometria de absorção atômica em forno de grafite

Rodrigo Canarin de Oliveira¹ (IC)*, Renata Nascimento Caetano (PG), Daniel L. G. Borges (PQ)

Universidade Federal de Santa Catarina, CFM – Departamento de Química, Campus Trindade, Florianópolis-SC

*rodrigo.canarin@grad.ufsc.br.

Palavras-chave: *Análise espectrométrica, Elementos traço, Alimentos, Suspensões.*

Introdução

A análise de sólidos preparados sob a forma de suspensões por espectrometria de absorção atômica em forno de grafite (GFAAS) é uma alternativa interessante, visto que possui características que a tornam vantajosa frente aos processos de digestão de amostras. Dentre as vantagens, citam-se a redução no risco de contaminação e perda de analito, principalmente quando se trata de espécies voláteis, a redução no tempo de preparo e a possibilidade de utilizar os sistemas para introdução de amostras líquidas [1]. Por sua vez, o cacau é amplamente consumido em todo o mundo e é uma fonte potencial de metais, o que justifica o desenvolvimento de métodos simples e rápidos para sua análise. Objetivou-se, portanto, desenvolver método para a análise de amostras de cacau em suspensão por GFAAS, visando à determinação de Ni.

Resultados e discussão

As curvas de pirólise e atomização demonstraram a elevada estabilidade térmica do analito nas suspensões de cacau, permitindo o uso de pirólise em 1000 °C e demandando atomização em 2600 °C. Demonstrou-se a possibilidade de conduzir a análise sem uso de modificador químico, o que simplifica o processo.

Com o intuito de avaliar a extração de Ni para a fase aquosa contendo HNO₃, procedeu-se com estudo multivariado. Os resultados demonstraram que o aumento na concentração de HNO₃ até 2,5% resultou na extração de até 49% de Ni para a fase aquosa. A superfície de resposta obtida com planejamento composto central é mostrada na Figura 2.

Como referência para as quantificações, foi realizada uma digestão por via úmida, tanto em bloco digestor, quanto com auxílio de um micro-ondas, de uma das amostras de cacau. As análises da amostra digerida foram conduzidas por GFAAS com diferentes estratégias de calibração e os resultados estão mostrados na Tabela 1, que sugere a necessidade de

conduzir calibração por adição de padrão para as análises.

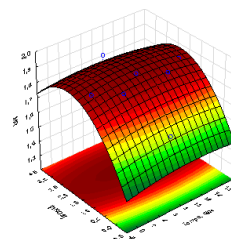


Figura 2. Superfície de múltipla resposta obtida por planejamento composto central para avaliar a extração de Ni a partir de suspensões de cacau preparadas em meio de HNO₃.

Tabela 1. Resultados obtidos para a quantificação de Ni em amostra de cacau por GFAAS.

	Ni / $\mu\text{g g}^{-1}$	F calculado*	t calculado*
Amostra digerida	7,9 ± 0,2	-	-
Suspensão / calibração externa	9,6 ± 0,3	2,25	11,55
Suspensão / adição de analito	10,5 ± 0,1	4,0	28,48

Conclusões

O método de determinação de Ni baseado na análise de suspensões por GFAAS mostrou-se simples, rápido e preciso. A exatidão do método carece de investigações mais detalhadas. Faz-se necessário o estudo e avaliação de outras técnicas de calibração, assim como a utilização de materiais de referência (CRM) para melhor estudo da exatidão.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq, PIBIC-UFSC e CAPES.

Referências e notas

- (1) Magalhães, C. E. de C., & Arruda, M. A. Z (1998). Amostragem de suspensões: Emprego da técnica na análise direta de amostras. *Química Nova*, 21(4), 459–466.

Estudo da reação de quimiluminescência do Luminol® como teste presuntivo na detecção de vestígios de sangue: avaliação das substâncias interferentes e tipos de superfícies

Júlia Collares dos Santos^{1*} (IC), Eduardo Grill da Silva Carvalho¹ (PG), Camilly Vitória Werner Thurow¹ (IC), Chaiani Battisti (IC)¹, Clarissa Marques Moreira¹ (PQ). juliacollaresdossantos@hotmail.com

¹Universidade Federal de Pelotas (UFPEL), Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos - CCQFA.

Palavras Chave: Luminol, Manchas de sangue, Quimiluminescência, Superfícies, Interferentes.

Introdução

A aplicação do luminol (5-amino-2,3-dihidroftalazina-1,4-diona) para reação quimiluminescente na detecção de vestígios de sangue oculto, ainda é o principal teste presuntivo utilizado pelos institutos periciais¹. A reação baseia-se na emissão de luz através da reação química entre o luminol, um agente oxidante, meio básico e um catalisador (metal). Desta forma, as características do meio reacional podem interferir na cinética da reação, com o tempo de reação, a duração e intensidade da emissão podendo variar de períodos muito curtos (menores que 1s) até muito longos (cerca de 1 dia), o que pode causar resultados falso-positivos ou falso-negativos². Nesse contexto, o presente estudo tem como objetivo avaliar a influência da reação quimiluminescente do luminol em diferentes superfícies, destacando-se os aspectos químicos e as substâncias interferentes para detecção de vestígios de sangue com o propósito de desenvolver metodologia que minimize reações de quimiluminescência das substâncias interferentes.

Resultados e discussão

Para os estudos iniciais foram respingados microlitros de sangue em superfícies como acrílico, azulejo, madeira crua, madeira envernizada, vidro e tecido. Posteriormente, foram feitas as remoções dos vestígios de sangue com agentes de limpeza como: água de torneira, detergente de glicerina e hipoclorito de sódio comercial com movimentos de fricção para limpeza. A metodologia de formulação do luminol® foi adaptada de acordo com o citado por Saito *et al.* (2020), onde uma solução aquosa de luminol 0,4% (m/v) com hidróxido de sódio 1% (m/v) foi preparada, assim como uma solução aquosa de peróxido de hidrogênio 0,5% (v/v), sendo misturadas na proporção 6:1. Após, a solução de luminol® comercial preparada no dia de uso, foi borrifada, observando a reação de quimiluminescência e fotografando os resultados obtidos. Na Figura 1, é mostrada a reação de quimiluminescência do luminol® em uma das superfícies avaliadas (acrílico), após

remoção dos vestígios de sangue com agentes de limpeza supracitados anteriormente.

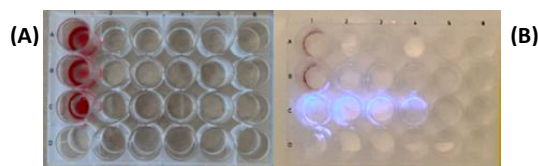


Figura 1. (A). Deposição de sangue na superfície de acrílico (poços da placa de cultura celular). (B) Aplicação de luminol® após remoção do sangue (água; água e detergente; e água e hipoclorito de sódio) para avaliação de falso-positivos.

Assim, na Figura 1, foi observado que o hipoclorito de sódio é um interferente, que apresenta reação de quimiluminescência para o luminol e indicativo de falso-positivo. Como o presente trabalho ainda se encontra em sua fase inicial, estudos de composição da formulação do luminol, será um dos principais requisitos para minimizar reações de quimiluminescência com substâncias interferentes em diferentes superfícies.

Conclusões

Conforme os resultados obtidos, foi possível constatar que o comportamento do luminol® perante as diferentes superfícies, interferentes e reação de quimiluminescência ainda é um desafio. Posteriormente, mais estudos sobre a aplicabilidade do luminol® na detecção de sangue, ainda estão sendo feitos, utilizando-se diferentes formulações, variáveis (tempo x temperatura), interferentes e tipos de superfícies.

Agradecimentos

À UFPEL e à Comissão Organizadora do SBQ Sul.

Referências

- (1) Barni, F. *et al.* *Talanta*. **2007**, 72, 897.
- (2) Creamer, J. I. *et al.* *Luminescence*. **2003**, 18, 193.
- (3) SAITO, K. *et al.* *Forensic Chemistry*. **2020**, 21.

COMPARAÇÃO DAS QUANTIDADES DOS GRUPOS FUNCIONAIS DETECTADOS NA SUPERFÍCIE DA TURFA DECOMPOSTA FINA (TDF) E TURFA FIBROSA SUPER FINA (FSF).

Bruna P. Szpoganicz (PG), Bruno Szpoganicz (PQ).*

belabruna@yahoo.com

Universidade Federal de Santa Catarina, Departamento de Química, Florianópolis, SC, Brazil.

Palavras Chave: (Turfa TDF, Turfa FSF).

Introdução

O objetivo deste trabalho é comparar a quantidade de grupos ácidos-básicos presentes na superfície da Turfa Decomposta Fina, TDF, com a Turfa Fibrosa Super Fina, FSF. A quantidade de cada grupo foi determinada por titulação potenciométrica, pelo consumo do titulante KOH isento de CO₂ e calculados com a ajuda do programa BEST7 (MARTELL, 1992; SIERRA, 2001).

Resultados e discussão

Tabela 1: Log K das constantes de protonação dos grupos detectados na superfície da Turfa, medidos 25°C e $\mu = 0,1$ (KCl).

	TDF	Mmol/g	FSF	Mmol/g
FENOL	9,57	0,266	8,94	0,418
CARBOXÍLICO	6,09	0,494	5,83	0,349
CATECOL	13,3	0,286	13,2	0,246
	8,06		9,65	
FTÁLICO	4,66	0,532	4,49	0,351
	2,07		2,45	
SALICÍLICO	13,4	0,439	13,4	0,189
	3,14		3,50	
X			7,80	0,482

Os resultados obtidos para os principais grupos detectados são mostrados na Tabela 1, os pKas médios e os mmols/g na segunda e terceira coluna são para a turfa TDF e na quarta e quinta coluna para a turfa FSF.

A ocorrência da Turfa TDF, é de 0 a 7 metros de profundidade no solo de Arroio Silva, SC. E a turfa FSF ocorre a uma profundidade de 0 a 3 m. Isso pode explicar as diferenças na composição molar dos grupos na superfície das partículas das turfas. Na classificação de FUCHSMAN a Turfa TDF é a mais antiga (7 a 10 mil anos) e seu grau de humificação é de H₇ à H₁₀. A turfa FSF é mais nova e ligeiramente decomposta e seu grau de humificação é de H₁ à H₃. Por isso a existência do Grupo X, que está sendo investigado e pode ser grupos aminicos com pKa médio de 7,8 (FUCHSMAN, 1980).

Conclusões

Tanto a Turfa TDF como a Turfa FSF apresentam grupos funcionais importantes para serem usados na quelação de metais. A FSF apresenta um grupo adicional de pKa = 7,80 que está sendo investigado.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPQ e a UFSC pelo financiamento da pesquisa.

Referencias e notas

- (1) FUCHSMAN, C. H. ; **Peat Industrial Chemistry** and Technology, 1a ed., London, UK :Academic Press, 1980, 279.
- (2) MARTELL, A. E.; MOTOKAITIS, R. J.; **Determination and use of Stability Constants**; 2a Ed. New York: VCH Publishers, 1992. 1-212.
- (3) SIERRA, M. M. S.; AREND, K.; FERNANDES, A.; GIONOVELA, M.; SZPOGANICZ, B.; *Analytica Chimica Acta*, 445, 2001, 89-98.

AVALIAÇÃO DE COLÁGENO EM ALIMENTOS POR ANÁLISE DIRETA DE SÓLIDOS USANDO A ESPECTROMETRIA DE FLUORESCÊNCIA MOLECULAR

Larissa Ramos Lima (IC)*, Eliézer Quadro Oreste (PQ), Juliano Carvalho Ramos (PQ).

Universidade Federal do Rio Grande, Escola de Química e Alimentos, Rio Grande, Rio Grande do Sul, Brasil, 96203-900
 e-mail* : larissa.l9849@gmail.com

Palavras Chave: Alimentos, Análise Direta de Sólidos, Colágeno, Espectrometria de Fluorescência Molecular.

Introdução

As proteínas são fundamentais para o funcionamento do organismo, desempenhando funções como: transporte, proteção imunológica, contração muscular, catálise enzimática e sustentação estrutural. Dentre elas, o colágeno possui diminuição em sua produção com o passar dos anos, tornando-se necessário suplementá-lo para prevenir doenças como osteoporose, osteoartrite, úlcera gástrica e hipertensão (1). Para facilitar o acesso ao colágeno, ele é incorporado em alimentos como gelatina, iogurte, suco, chá, presunto e salsicha, obtidos principalmente de fontes bovinas, suínas e marinhas (2). O método oficial para identificação e quantificação de colágeno emprega a espectrometria de absorção molecular, o qual requer ácidos concentrados, reagentes e preparo de amostra moroso (3). A proposta deste trabalho é aliar a análise direta de sólidos com a espectrometria de fluorescência molecular para monitoramento de colágeno em alimentos, promovendo um método mais rápido, com menor geração de resíduos e consumo de reagentes, sensível e seletivo (4, 5).

Resultados e discussão

Foram obtidos espectros em 3D, contendo dados de comprimento de onda de excitação vs comprimento de onda de emissão vs intensidade de fluorescência, para o colágeno sólido (Éxodo Científica) na faixa espectral de 300-400 nm para excitação e de 400-800 nm para emissão. Para verificação do melhor tamanho da fenda de emissão, foi fixado o tamanho da fenda de excitação em 5,0 nm e as fendas de emissão avaliadas foram de (1,0;3,0;5,0;10,0;15,0 e 20,0 nm). Para verificação do melhor largura da fenda de excitação, fixou-se a fenda de emissão em 10,0 nm e as fendas de excitação avaliadas foram (1,5;3,0;5,0;10,0;15,0 e 20,0 nm). Os resultados demonstraram que: as melhores aberturas de fenda foram de 5,0 nm para a excitação e 10,0 nm para emissão; o comprimento de onda ótimo de excitação é 357nm e emissão 435-445nm. Com as condições otimizadas, foram obtidos espectros de fluorescência utilizando o Espectrômetro de Fluorescência Molecular (Modelo RF-6000, SHIMADZU) para quatro alimentos sólidos, que possuem colágeno em sua composição sendo eles gelatina, salsicha, hambúrguer bovino e steak de frango (todas as amostras foram previamente

liofilizadas e trituradas). Os espectros de fluorescência para a gelatina, salsicha e hambúrguer bovino apresentaram região característica do colágeno, confirmando a presença dessa proteína nas amostras selecionadas. Entretanto, o steak de frango apresentou fluorescência mais significativa em comprimento de onda maior que 400 nm, sugerindo a presença de outra substância fluorescente ou deslocamento da região de fluorescência do colágeno devido aos componentes da amostra.

Conclusões

Os resultados apresentados demonstram a viabilidade da análise direta de sólidos com a fluorescência molecular para identificação do colágeno em alimentos. O preparo de amostra se mostrou simples e breve, e a espectrometria de fluorescência molecular revelou ter sensibilidade adequada para detecção do colágeno em amostras de alimentos de consumo comum. Medidas quantitativas estão sendo realizadas e os parâmetros de mérito serão também obtidos. A exatidão será avaliada por meio de comparação com o método oficial descrito pela AOAC¹.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao EQA da FURG pela infraestrutura para realização dos experimentos.

Referências e notas

¹AOAC - Associação de Químicos Analíticos Oficiais, do inglês *Association of Official Analytical Chemists*

- (1) OLIVEIRA, V. M.; et al. Collagen: general characteristics and production of bioactive peptides - a review with emphasis on byproducts of fish. **Acta of Fisheries and Aquatic Resources**. v. 5, n. 2, p. 56-68, 2017.
- (2) HASHIM, P. et al. Collagen in food and beverage industries. **International Food Research Journal**. v. 22, p. 1 – 8, 2015.
- (3) Da SILVA, C. M. L.; SPINELLI, E.; RODRIGUES, S. V. Fast and sensitive collagen quantification by alkaline hydrolysis/hydroxyproline assay. **Food Chemistry**, v. 173, p. 619-623, 2015.
- (4) KRUG, F. J.; ROCHA, F. R. P. Métodos de Preparo de Amostras Para Análise Elementar. 2 ed., p. 143- 178, São Paulo: EditSBQ – Sociedade Brasileira de Química, 2019.
- (5) AHMAD, M.H.; SAHAR, A.; HITZMANN, B. Fluorescence Spectroscopy for the Monitoring of Food Processes. **Springer International Publishing**, 2017.

DESENVOLVIMENTO DE MÉTODO PARA DETERMINAÇÃO DE TRICLOSAN EM ÁGUAS AMBIENTAIS

Alice Rosa da Silva (ICJ)*, Mariana Formagio (IC), Antônio Miguel Gomes Lima (PG), Lenise Guimarães de Oliveira (PQ), Márcia Helena Scherer Kurz (PQ), Fábio Ferreira Gonçalves (PQ).

*alicedasilva234233@gmail.com**

1. Universidade Federal do Rio Grande - FURG. Rua: Barão Cahy, 125 – Cidade Alta, Santo Antônio Da Patrulha – RS, 95500 – 000. Palavras Chave: triclosan, HPLC-DAD, extração em fase sólida, águas ambientais

Introdução

Atualmente, os resíduos de produtos de cuidado pessoal, como sabonetes antibacterianos, cremes dentais, desodorantes e produtos de limpeza são descartados incorretamente, causando vários danos ao meio ambiente. O princípio ativo conhecido como triclosan, um eficaz agente antibacteriano, está presente nesses produtos de consumo comuns.¹ Devido ao descarte incorreto dos produtos de higiene no meio ambiente, o Triclosan acaba sendo encontrado com facilidade em águas residuárias.²

O objetivo desta pesquisa foi desenvolver e validar um método analítico baseado na otimização da extração em fase sólida (SPE) para identificar o triclosan em amostras de água ambientais.

O estudo abrange desenvolvimento de método para análise de triclosan, um contaminante emergente. Para separação cromatográfica utilizou-se a Cromatografia Líquida com Detecção por Arranjo de Diodos (HPLC-DAD). Utilizou-se coluna Novapak C18 (150 X 3,9 mm), Waters. As fases móveis usadas foram: água ultra pura com 0,1% de ácido fórmico e acetonitrila (ACN) (40:60), com vazão de 1,0 mL min⁻¹. O volume de injeção foi de 20 µL e o comprimento de onda foi de 200 nm. Para a técnica de SPE, foram utilizados cartuchos C18 200 mg com fator de pré-concentração de 250 vezes.

Este trabalho está vinculado ao Projeto “Apoio a Projetos de Pesquisa/Chamada MCTI/CNPq/Nº 10/2023 Municipal”, no qual alunos bolsistas do Ensino Fundamental do município de Santo Antônio da Patrulha (SAP) desenvolvem projetos de Iniciação Científica Júnior na Universidade Federal do Rio Grande, Campus SAP (FURG-SAP), juntamente com os demais graduandos e pós-graduandos no laboratório.

Resultados e discussão

A validação do método foi feita através dos seguintes parâmetros: curva analítica e linearidade, limite de detecção e de quantificação, recuperação e precisão.³ A curva analítica apresentou valor de R² maior que 0,99, com faixa linear entre 0,05 e 5 mg L⁻¹. Os resultados de recuperação variaram entre 70 e

120%, com RSD menor que 20%, para os níveis de 0,4; 2,0 e 10,0 µg L⁻¹. A Figura 1 apresenta um cromatograma ilustrativo para uma fortificação em água ultra pura e um padrão analítico.

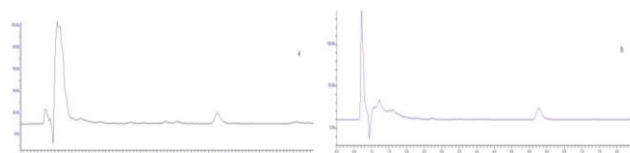


Figura 1. Cromatograma (a) fortificação no nível de 2 µg L⁻¹ e (b) padrão na concentração de 0,5 mg L⁻¹

Conclusões

A presente pesquisa consistiu no desenvolvimento de método analítico para determinação de Triclosan em água empregando HPLC-DAD e SPE. O método mostrou-se eficiente e os parâmetros de validação obtidos ficaram dentro dos limites determinados para métodos cromatográficos. Assim, o método poderá ser aplicado para análise de amostras de águas ambientais da região.

Agradecimentos

CNPq - Chamada MCTI/CNPq/SECIS No 10/2023, LARCO, MCCSAP, PPGQTA e FURG.

Referências e notas

- (1) MILANOVIĆ, M.; ĐURIĆ, L.; MILOŠEVIĆ, N.; MILIĆ, N. **Comprehensive insight into triclosan—from widespread occurrence to health outcomes**. Environmental Science and Pollution Research, 6 nov. 2021. Acesso em: 1 abr. 2022.
- (2) AMIGUN TAIWO, AZEEZAH *et al.*, **Occurrence, effects, detection, and photodegradation of triclosan and triclocarban in the environment: a review**. International Journal of Environmental Analytical Chemistry, p. 1–19, 2022.
- (3) ANVISA (AGÊNCIA NACIONAL DE VIGILÂNCIA SANITÁRIA); **Guia de Validação de Métodos Analíticos e Bioanalíticos**, RE nº 899, 2003.

Propriedades Químico-Mecânicas de Vidros Produzidos com A Cinza da Casca de Arroz

Matheus Ramalho Chim^{1*} (PG), João Manoel Martins Marçal¹ (IC), Jacson Weber de Menezes¹ (PQ), Chiara Valsecchi¹ (PQ). E-mail: matheuschim.aluno@unipampa.edu.br

¹Programa Pós-Graduação em Engenharia, Universidade Federal do Pampa, Alegrete, RS.

Palavras Chave: sustentabilidade, resíduo agrícola, vidros soda-cal.

Introdução

O vidro é um dos materiais mais comuns e mais produzidos industrialmente no mundo inteiro. A principal matéria prima do vidro é a sílica (SiO_2), tendo como sua fonte a areia mineral de quartzo; entretanto a extração desse material tem causado severos danos ao meio ambiente [1,2]. Por outro lado, existe um outro resíduo da queima da casca do arroz, a cinza da casca de arroz (CCA – Figura 1a) que gera outro tipo de problema ambiental, que contém sílica capaz de substituir a areia na fabricação do vidro [3]. Assim, este trabalho tem como objetivo descrever as propriedades do vidro produzido substituindo a areia pela cinza da casca de arroz.

Resultados e discussão

As amostras foram produzidas na temperatura de 1200°C , conforme a composição utilizada por Gonçalves [3]. Os componentes do vidro foram adicionados nas seguintes porcentagens: 40% de sílica (SiO_2 – oriundo da CCA), 22% de óxido de sódio (Na_2O), 3% de óxido de cálcio (CaO) e 35% de óxido de boro (B_2O_3). A mistura homogênea foi levada ao forno mufla por uma hora em 1000°C e sucessivamente duas horas em 1200°C , com uma taxa de aquecimento de $10^\circ\text{C}/\text{min}$. O vidro foi vertido em uma chapa de aço pré-aquecida em 400°C e levado ao forno ajustado na mesma temperatura por uma hora. Por fim, as amostras foram resfriadas lentamente até a temperatura ambiente (Figura 1b).

Os testes realizados para comparação com o vidro feito com areia mineral como fonte de sílica foram: Fluorescência de raios X (FRX), teste de choque térmico, microdureza e ataque ácido. Como resultado obtivemos valores de FRX que mostram a pureza da sílica na CCA de 89,45% enquanto a areia possui 99,99% de pureza. Relativo a microdureza, o teste revelou que o vidro de areia possui uma dureza de 1011,9 vh, bem superior à dureza 541,13 vh do vidro feito com a CCA. Contudo, o vidro da CCA mostrou-se

mais resistente ao choque térmico, embora apresentando microfissuras (Figura 2).

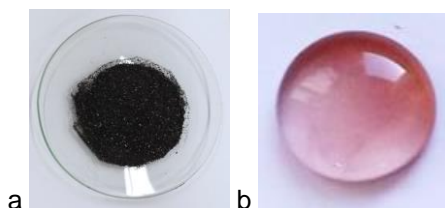


Figura 1. a) Cinza da casca do arroz. b) Vidro feito com a cinza da casca do arroz.

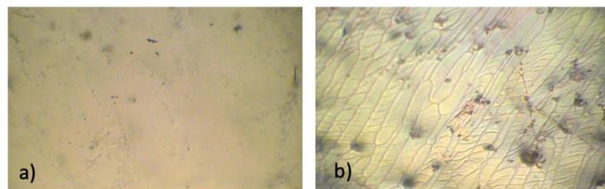


Figura 2. a) Vidro de areia mineral a) antes do teste b) depois do ensaio de choque térmico.

Conclusões

O trabalho contribui para concretizar a possibilidade de fabricar vidro com um resíduo da indústria orizícola, mostrando desvantagens e vantagens sobre a substituição da areia pela cinza da casca do arroz em sua produção, provando que podemos obter um vidro mais sustentável com características similares ao comercialmente disponível.

Agradecimentos

Os autores agradecem a Fapergs (Inovacluster 2022) e o CNPq (Universal 2021- 407045/2021-0) para o suporte financeiro.

Referencias e notas

- (1) DUAN, H. *Science of the Total Environment*, v. 647, p. 606-618, 2019.
- (2) MAIA, B. G. O. et al.; *Cerâmica Industrial*, v. 22, p. 32 - 39, 2017.
- (3) Gonçalves J. *Ceramics*. 2020;3:494-506.



SBQ SUL

29º Encontro de Química da Região Sul

Um olhar para o futuro

QUÍMICA INORGÂNICA

Sessões Coordenadas

19 de outubro (Quinta-feira) - Sala 308

	Palestrante: Prof. Dr. Edilson Valmir Benvenutti (UFRGS) Um século de Química Inorgânica e Ciência de Materiais
INO 002	Meso-free porfirinas: fotofísica e propriedades fotobiológicas de Porfirinas trans-substituídas. Rafaela Copello da Cunha (IC), Klaus Krambroch (PQ), Bernardo Almeida Iglesias (PQ) - UFSM
INO 003	Estruturas zeolítica imidazolato (ZIFs) modificadas para transformação catalítica do CO₂. Daniel Rapachi (PG), Vanessa B. Mortola (PQ), Marcos A. Gelesky (PQ) - FURG
INO 017	Síntese, caracterização e estudo de estabilidade de nanopartículas de prata verdes reduzidas com dois diferentes dissacarídeos. Rita de Cássia dos Reis Schmidt (PG), Monique Deon (PQ) - UFCSPA
INO 018	Complexo de Cu(II) contendo ligante fenolato-imina com grupo pendente amina N-doador com potencial atividade antitumoral e antioxidante. Taise C. Nunes (IC), Ianka J. Nunes (PG), Renieidy Flávia C. Dias (PG), Osvaldo de L. Casagrande Jr. (PQ), Jenifer Saffi (PQ), Adriana C. Pinheiro (PQ) - UFPEL
INO 022	Síntese da Ni-MOF a partir do ácido glutâmico e carbonato básico de níquel. Luana T. C. Silva (PG), Rodrigo V. Rodrigues (IC), Sílvia D. de Campos (PQ), Ronan F. F. de Souza (PQ), Élvio Antônio de Campos (PQ) - UNIOESTE

20 de outubro (Sexta-feira) - Sala 308

	Palestrante: Prof. Dr. Bernardo Almeida Iglesias (UFSM) Química dos Corróis – O início em terras brasileiras
INO 009	Síntese, caracterizações e interações com DNA de complexos zwitteriônicos de dióxido vanádio(V) derivados de ligantes imínicos contendo trifenilfosfônio. Francisco M. Martins (PG), Bernardo A. Iglesias (PQ), Otávio A. Chaves (PG), Davi F. Back (PQ) - UFSM
INO 013	Novo complexo tetranuclear de cobre(II) para hidrólise de triéster de fosfato. Edinara Luiz (PG), Thomas Pereira (IC), Fernando R. Xavier (PQ), Rosely A. Peralta (PQ) - UFSC
INO 020	Modificação de sílica mesoporosa SBA-15, utilizando Ferro II e o uso de reagente Fenantrolina para quantificação. Wanderson da Silva Roriz (PG), Gabriel Tavares Couto (IC), Célia Francisca Centeno da Rosa (PQ), Daniela Bianchini (PQ) - UFPEL
INO 021	Síntese, caracterização e avaliação de citotoxicidade de um novo complexo de cobre contendo ligante tridentado fenolato-imina com átomos doadores N,N,O. Alecia Ferreira da Silva (IC), Ianka Jacondino Nunes (PG), Renieidy Flávia C. Dias (PG), Osvaldo de Lazaro Casagrande Jr. (PQ), Jenifer Saffi (PQ), Adriana Castro Pinheiro (PQ) - UFPEL

Pôsteres

INO 001	<i>Ligantes Tiossemicarbazona Derivados da Carvona: Investigação dos Novos Complexos de Cobre(II) e Níquel(II) através da Espectroscopia no Infravermelho.</i> Thaís S. Conter (IC), Leandro Bresolin (PQ), Ana Paula L. de Melo (PG), Vanessa C. Gervini (PQ), Laura D. de Avila (IC) - FURG
INO 004	<i>Propriedades fotofísicas e fotobiológicas de corróis contendo grupos carboxil e éster.</i> Morgana Maciél Oliveira (PG), Bernardo Almeida Iglesias (PQ) - UFSM
INO 005	<i>Caracterização dos óxidos impregnados TiO₂ e Ag/TiO₂ e avaliação da atividade antimicrobiana.</i> Caroline Zarzeka (PG), Jonas Goldoni (TC), Filomena Marafon (TC), Margarete Dulce Bagatini (PQ), Leda Maria Saragiotto Colpini (PQ) - UFPR
INO 006	<i>Au(0)/SnO₂ Nanoparticles with Photocatalytic Properties.</i> Letícia Cristina Modanez (IC), Daniel Rapachi (PG), Marcos Alexandre Gelesky (PQ) - FURG
INO 007	<i>Fotofísica e propriedades fotobiológicas de fluorenil-corróis.</i> Bruna M. Rodrigues (IC), Bernardo Almeida Iglesias (PQ) - UFSM
INO 008	<i>Determinação das propriedades fotofísicas de aril-triazenos com possível aplicação em química de sensores.</i> Jenifer L.O. da Rosa (IC) e Bernardo A. Iglesias (PQ) - UFSM
INO 010	<i>Síntese, caracterização e avaliação do perfil antifúngico contra Sporothrix brasiliensis de um novo complexo de Cu(II) contendo ligante naftalato-imina.</i> Thaís C. Vann (PG) , Ianka J. Nunes (PG), Stefanie B. Waller (PQ), Marlete B. Cleff (PQ), Osvaldo de L. Casagrande Jr. (PQ), Márcia K. Ripoll (PQ) , Renata Osório de Faria (PQ), Angelita dos Reis Gomes (PQ), Paula Priscila C. da Costa (PQ), Adriana C. Pinheiro (PQ) - UFPEL
INO 011	<i>Desenvolvimento de microestruturas de compostos de coordenação encapsulados em quitosana.</i> Thomas Pereira (IC), Edinara Luiz (PG), Mariele Paludetto (PG), Alexandre Luis Parize (PQ) Rosely Peralta (PQ) - UFSC
INO 012	<i>Síntese e caracterização de nanopartículas de ouro no Desenvolvimento de filmes biopoliméricos 3D-impresos.</i> Júlia Lazzarini Machado (IC), Monique Deon (PQ), Marcelo Pereira (PQ) - UFCSPA
INO 014	<i>Uso de imidazo(lapachona)corrol como sensor de biomoléculas.</i> Sarah Giesel (IC), Bruna M. Rodrigues (IC), Esther R. S. Paz (PG), Eufrânio N. da Silva Júnior (PQ) e Bernardo A. Iglesias (PQ) - UFSM
INO 015	<i>Nanocarreadores à base de sílica para encapsulação do antibiótico levofloxacino.</i> Eduardo Guimarães Oliveira de Lima (IC), Edilson Valmir Benvenuto (PQ), Monique Deon (PQ) - UFCSPA
INO 016	Nathalia S. de Oliveira (PG) , <i>Síntese, caracterização e estudos de estabilidade em solução de novos complexos de Co(II) contendo ligantes fenolato-imina com grupos doadores N de amina pendente.</i> Wesley V. Ferreira (PG) , Renieidy Flávia C. Dias (PG) , Osvaldo de L. Casagrande Jr. (PQ) , Adriana C. Pinheiro (PQ) - UFPEL
INO 019	<i>Síntese e caracterização de complexos de cobre (II) contendo ligantes amino-pirazóis de interesse medicinal.</i> Elvis F. Silveira Jr. (IC), Tamara dos S. Machado (PG), Renieidy Flávia C. Dias (PG), Wilson C. Filho (PQ), Adriana C. Pinheiro (PQ) - UFPEL
INO 022	<i>Síntese da Ni-MOF a partir do ácido glutâmico e carbonato básico de níquel.</i> Luana T. C. Silva (PG), Rodrigo V. Rodrigues (IC), Sílvia D. de Campos (PQ), Ronan F. F. de Souza (PQ), Élvio Antônio de Campos (PQ) - UNIOESTE

Ligantes Tiossemicarbazona Derivados da Carvona: Investigação dos Novos Complexos de Cobre(II) e Níquel(II) através da Espectroscopia no Infravermelho

Thaís S. Conter*(IC)¹, Leandro Bresolin(PQ)¹, Ana Paula L. de Melo(PG)¹, Vanessa C. Gervini(PQ)¹, Laura D. de Avila(IC)¹. *thaissconter@gmail.com

¹ Universidade Federal do Rio Grande, Escola de Química e Alimentos, Av. Itália, Km 8, Campus Carreiros, Rio Grande/RS.

Palavras Chave: Tiossemicarbazona, Infravermelho, Carvona; Complexo de Ni(II), Complexo de Cu(II).

Introdução

A síntese e o estudo de ligantes tiossemicarbazonas têm atraído interesse científico devido à sua atividade biológica e capacidade complexante¹. São compostos orgânicos nitrogenados considerados como base de Schiff, com alta capacidade de complexação de metais de transição². A Carvona também tem demonstrado ser bastante promissora na área da farmacologia³. Este trabalho tem por objetivo a síntese e caracterização por espectroscopia na região do Infravermelho do ligante tiossemicarbazona derivado da Carvona e seus complexos de Cu(II) e Ni(II).

Resultados e discussão

Figura 1. Esquema da síntese dos ligantes e complexos.



O ligante apresentou ponto de fusão de 154°C e rendimento de 58%; complexo de Ni(II) um ponto de fusão de 280°C e rendimento de 39%; e o complexo de Cu(II) 175-180°C e rendimento de 34%.

Tabela 1. Comparação dos valores de estiramento para o ligante tiossemicarbazona e seus complexos de Cu(II) e Ni(II).

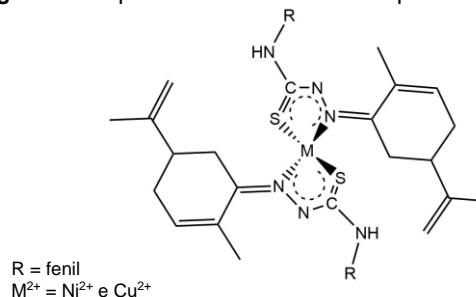
Atribuições (cm ⁻¹)	CARV-FTSC	Complexo de Ni(II)	Complexo de Cu(II)
$\nu(\text{C}=\text{N})$	1590 (m)	1597 (f)	1589 (f)
$\nu(\text{C}=\text{S})$	891 (F)	893 (f)	887 (f)
$\nu(\text{NH})$ *secundário	3412 (f)	3450 (f)	3600 (f)
$\nu(\text{NH})$ *imínico	3273 (F)	-	-
$\nu(\text{C}=\text{C})$ *ciclo alceno	1650 (m)	1650 (f)	1648 (f)

*Intensidade: f= baixa; m=média; F= forte.

Confirmou-se a possível formação do ligante e seus complexos através da análise de espectroscopia na região de infravermelho (Tabela 1), onde destaca-se os

principais deslocamentos das ligações C=S, C=N e o desaparecimento do estiramento N-H, sugerindo a formação dos complexos Ni(II) e Cu(II) derivados do ligante CARV-FTSC e a presença de anéis quelatos pentagonais (Figura 2).

Figura 2. Proposta de estrutura do complexo obtido.



Conclusões

A síntese e caracterização do complexo obtido neste trabalho indicam a possível presença de uma geometria molecular quadrada plana. Essa pesquisa contribuiu significativamente para o estudo da química de coordenação dos ligantes tiossemicarbazonas derivados de compostos contendo os íons Ni(II) e Cu(II), abrindo caminho para futuras investigações na área da química de coordenação e sua aplicação em diferentes áreas da ciência, como a química medicinal.

Agradecimentos

CAPES/CNPq.

Referências e notas

- (1) SOUZA, M. R. P. et al. Synthesis of novel (-)- Camphene-based thiosemicarbazones and evaluation of anti-Mycobacterium tuberculosis activity. *Natural Product Research*, **2018**.
- (2) LOBANA T. S. et al. Bonding and structure trends of thiosemicarbazone derivatives of metals - An overview. *Coordination Chemistry Reviews*, V. 253, p. 977-1055, **2009**.
- (3) BOUYAHYA, A. et al. Health Benefits and Pharmacological Properties of Carvone. *Biomolecules*, vol. 11, n. 12, p. 1803, Dez. de **2021**.

Meso-free porfirinas: fotofísica e propriedades fotobiológicas de porfirinas *trans*-substituídas

Rafaela Copello da Cunha (IC)¹, Klaus Krambroch (PQ)², Bernardo Almeida Iglesias (PQ)¹. rafacop09@gmail.com

¹Laboratório de Bioinorgânica e Materiais Porfirínicos, Departamento de Química, CCNE, UFSM, Santa Maria, RS 97105-900, Brasil

²Laboratório de Ressonância Magnética, Departamento de Física, UFMG, Belo Horizonte, MG 30123-970, Brasil

Palavras Chave: Porfirinas, Fotofísica, Fotobiologia.

Introdução

As porfirinas, em geral, são macrociclos tetrapirrólicos que apresentam propriedades fotofísicas atrativas, principalmente de acordo com a mudança na polaridade do solvente. Dependendo da natureza do solvente, eles podem apresentar comportamento diferente no estado fundamental e no estado excitado^{1,2}. Derivados de porfirina contendo diferentes grupos em posições opostas (*trans*) podem apresentar diferentes propriedades fotofísicas e fotobiológicas, devido sua estereoquímica. Neste trabalho, relatamos a análise fotofísica e fotobiológica de derivados de porfirina *trans*-substituídas.

Resultados e discussão

As porfirinas *trans*-substituídas (**Figura 1**) foram sintetizadas pela reação entre um dipirrometano e um aldeído, em meio ácido, de acordo com a literatura.³

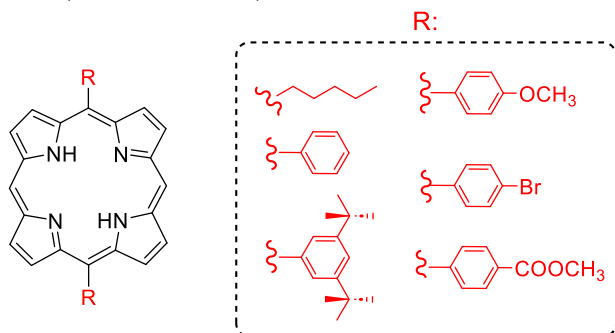


Figura 1. Representação estrutural das porfirinas *trans*-substituídas utilizadas neste estudo.

Resultados preliminares mostram que estes derivados são influenciados pela natureza do solvente (principalmente por variações nas bandas de Soret), emitindo fluorescência na região entre 600-800 nm e apresentam tempos de vida de fluorescência curtos (entre 1,0 a 10 ns). Foto-estabilidade, ensaios de

geração de EROs (oxigênio singlete e superóxido) também foram avaliados por espectroscopia e EPR.

Conclusões

Os compostos apresentaram resultados satisfatórios quanto as propriedades fotofísicas, bem como resultados satisfatórios de fotobiologia quando associados a antibióticos.

Agradecimentos

Os autores agradecem a CAPES, CNPq e FAPERGS, pelo apoio financeiro.

Referências e notas

- (1) Kadish, K.M.; Smith, K.M.; Guillard, R.; The Porphyrin Handbook; Academic Press, San Diego, 2010, vol.1-22.
- (2) M.C. Gomes, S. Silva, M.A.F. Faustino, M.G.P.M.S. Neves, J.A.S. Cavaleiro, A. Almeida, A. Cunha, J.P.C. Tomé, Photochem. Photobiol. Sci., 2013, 12, 262.
- (3) OKUN, Z. et al. Cellular Uptake and Organ Accumulation of Amphipolar Metalloporphyrins with Cytoprotective and Cytotoxic Properties. Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry, v. 11, n. 4, p. 380–384, 2023.
- Flamigni, L.; Gryko, D. T., Chem. Soc. Rev. 2009, 38, 1635–1646.

Estruturas zeolítica imidazolato (ZIFs) modificadas para transformação catalítica do CO₂

Daniel Rapachi (PG)^{1*}, Vanessa B. Mortola (PQ)², Marcos A. Gelesky (PQ)¹

danielrapachi@furg.br

¹Laboratório de Catálise e Síntese Inorgânica, Programa de Pós-Graduação em Química Tecnológica e Ambiental, Escola de Química e Alimentos, Universidade Federal do Rio Grande, Avenida Itália, km 08, 96201900, Rio Grande, RS, Brazil.

²Laboratório de Catálise e Reatores Químicos, Escola de Química e Alimentos, Universidade Federal do Rio Grande, Avenida Itália, km 08, 96201900, Rio Grande, RS, Brazil.

Palavras Chave: ZIF-8, ZIF-67, modificação, catálise.

Introdução

Dióxido de carbono (CO₂) é um gás que tem contribuído para o aumento do efeito estufa. Assim, alternativas vêm sendo estudadas e desenvolvidas com o intuito de mitigar, neutralizar e agregar valor ao CO₂, transformando-o em produtos de valor agregado (1,2). Dentre as alternativas, o uso da hidrogenação catalítica do CO₂, sobre a superfície de um catalisador ativo pode ser um caminho alternativo para a transformação do CO₂ (3). Entre os inúmeros catalisadores, as estruturas zeolíticas imidazolato (Zeolitic Imidazolate frameworks, ZIFs), apresentam elevado potencial para serem empregadas em aplicações como absorção, separação, catálise, sensores e dentre outras (3). Isso deve-se à sua elevada área superficial, porosidade, cristalinidade e estabilidade (3-5). Wen *et al.* (6) descrevem que o catalisador ZIF-8@PdAg@ZIF-8 apresentou alta atividade catalítica na conversão do CO₂ a ácido fórmico. Ostad *et al.* (7) apresentaram o potencial fotocatalítico de ZnO, Pt, Au e Cu suportados em ZIF-8, seletivos para transformação de CO₂ em metanol. Semelhantemente Su *et al.* (8) descrevem o potencial fotocatalítico de Au@PtAg encapsulada em ZIF-8 para conversão do CO₂ em CO.

Assim, o objetivo do estudo é desenvolver estruturas ZIFs 8 e 67 modificadas com paládio (Figura 1) com potencial aplicação catalítica na conversão do CO₂.

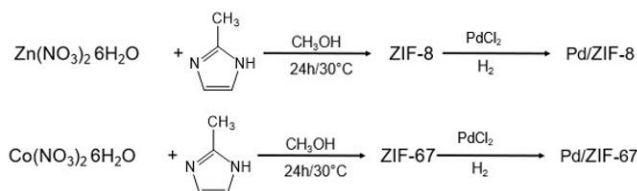


Figura 1. Estruturas zeolítica imidazolato 8 e 67 modificadas.

Resultados e discussão

As estruturas ZIF-67 e ZIF-8 apresentaram formato dodecaédrico e homogêneo, com tamanho médio de 365 ± 85 nm e 99 ± 16 nm, respectivamente, com uma estrutura cristalina do tipo sodalita, pertencendo ao

grupo espacial I43m. Nota-se que, mesmo após a modificação a estrutura cristalina sodalita manteve-se a mesma. Quanto ao band gap, as estruturas ZIF-67 e ZIF-8 apresentaram valores de 1,98 eV e 5,06 eV, respectivamente, enquanto as estruturas Pd/ZIF-67 e Pd/ZIF-8 apresentaram band gaps de 1,96 eV e 5,10 eV, respectivamente.

As características morfológicas e estruturais dos ZIF-67, ZIF-8 e Pd/ZIFs, associadas com a composição do ligante 2-metilimidazol e a composição dos íons metálicos (Co²⁺ e Zn²⁺), podem conferir uma elevada capacidade de adsorção e ativação do CO₂ e do H₂, para posterior conversão em produtos de valor agregado.

Conclusões

Através deste estudo, foi possível obter as estruturas ZIF-67 e ZIF-8 modificadas com paládio. As características do material, como morfologia, estrutura cristalina, band gap e composição química, sugerem que esses materiais podem ser utilizados como catalisadores na reação de hidrogenação do CO₂, para produtos de valor agregado.

Agradecimentos

Os autores agradecem à CAPES pelo apoio financeiro parcial e ao PPGQTA, pela bolsa de estudo e, ao Centro de Microscopia Eletrônica da Zona Sul e ao Centro Integrado de Análise, pelas análises realizadas.

Referências e notas

- (1) Vieira, S. S., *et al.* *Revista Virtual de Química*. **2022**, 14.
- (2) Olajire, Abass A. *Journal of CO₂ Utilization*. **2013**, 3.
- (3) Abdelhamid, H. N. *Applied Organometallic Chemistry*. **2022**, 36.
- (4) Timofeeva, M. N., *et al.* *Russian Chemical Bulletin*. **2022**, 71.
- (5) Kukkar, P., *et al.* *Coordination Chemistry Reviews*. **2021**, 446.
- (6) WEN, M., *et al.* *Scientific Reports*. **2019**, 9, 15675.
- (7) Ostad, M. I.; Shahrak, M. N.; Galli, F. *Journal of CO₂ Utilization*. **2021**, 43, 101373.
- (8) Su, Y., *et al.* *Nano Research*. **2019**, 12.

Propriedades fotofísicas e fotobiológicas de corróis contendo grupos carboxil e éster.

Morgana Maciel Oliveira (PG)¹, Bernardo Almeida Iglesias (PQ)¹. morgana.maciel_oliveira@yahoo.com.br

¹Laboratório de Bioinorgânica e Materiais Porfirínicos, Departamento de Química, CCNE, UFSM, Santa Maria, RS 97105-900, Brasil
Palavras Chave: Corróis, Fotofísica, Fotobiologia.

Introdução

Corróis são moléculas formadas por unidades de pirrol e semelhantes a seus análogos porfirínicos. Sua diferença estrutural encontra-se na ausência de um carbono meso nos corróis, o que ocasiona em uma ligação direta entre duas unidades de pirrol.¹ A ligação direta pirrol-pirrol propicia aos corróis propriedades únicas e aplicações notáveis em catálise, medicina, corante para conversão de energia solar, aplicações ópticas e de detecção.² Dependendo da estrutura eletrônica de seus substituintes esses compostos podem apresentar boa fotoestabilidade, alto rendimento de produção de espécies reativas de oxigênio (ERO) e interação com biomoléculas alvo.³

Resultados e discussão

Os corróis monosubstituídos 5,15-(pentafluorofenil)-10-(4-carboxifenil)corrol e 5,15-(pentafluorofenil)-10-(4-metoxifenil)corrol foram sintetizados de acordo com a literatura já descrita dos mesmos.^{4,5}

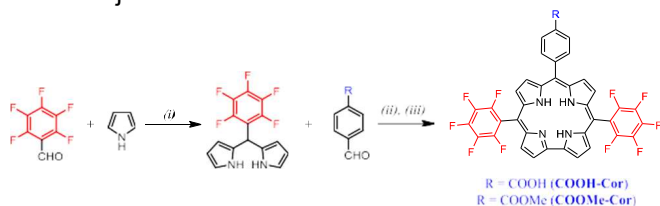


Figura 1. Síntese dos corróis COOH-Cor e COOMe-Cor usados neste estudo. *Etapas (i)* TFA, Ar atm, 5 min.; *(ii)* MeOH/H₂O, HCl 37%, t.a, 2 h; *(iii)* DDQ, DCM, t.a., 15 min.

A partir da síntese dos compostos os mesmos foram submetidos a testes de emissão e absorção em diferentes solventes (DCM, ACN, MeOH, DMSO e DMSO 5%), teste de fotoestabilidade em luz branca e vermelha, teste de produção de oxigênio singlete e superóxido. Os compostos também foram submetidos a testes de aplicações fotobiológicas. Alguns dos resultados obtidos podem ser observados na figura 2.

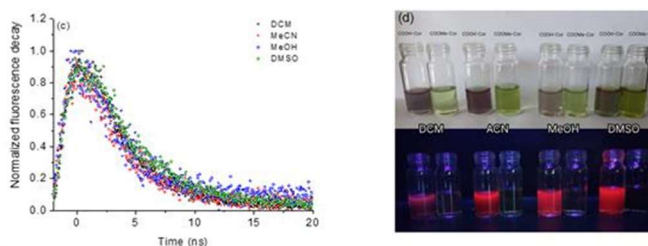
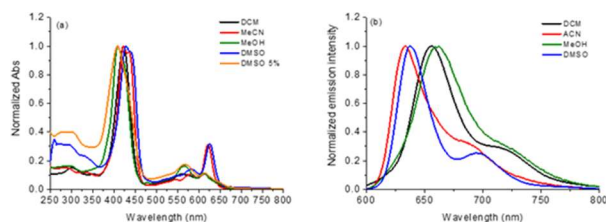


Figura 2. (a) Espectros de absorção normalizados do corrol COOH-Cor, (b) espectros de emissão de fluorescência do corrol COOH-Cor, (c) gráfico de decaimento de tempo de vida do corrol COOH-Cor e (d) fotografia dos corróis COOH-Cor e COOMe-Cor em solução sob luz natural e lâmpada UV (365 nm).

Conclusões

Os compostos apresentaram resultados satisfatórios quanto as propriedades fotofísicas, bem como resultados satisfatórios de fotobiologia quando associados a antibióticos.

Agradecimentos

Os autores agradecem a CAPES, CNPq e FAPERGS, pelo apoio financeiro.

Referencias e notas

- Gross, Z., Galili, N., & Saltsman, I. *Angewandte Chemie International Edition*, 1999, 38, 1427- 1429.
- Yadav, O., Varshney, A., Kumar, A., Ratnesh, R. K., & Mehata, M. S. (2018). A2B corroles: Fluorescence signaling systems for sensing fluoride ions. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 202, 207-213.
- OKUN, Z. et al. Cellular Uptake and Organ Accumulation of Amphipolar Metalloporroles with Cytoprotective and Cytotoxic Properties. *Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry*, v. 11, n. 4, p. 380–384, 2023.
- OELMANN, J. et al. Biometal Corrole Active Esters and Their Amino Acid and Peptide Conjugates. *European Journal of Inorganic Chemistry*, v. 2020, n. 32, p. 3059–3069, 9 jul. 2020.
- HONIG, Hilah C. et al. Structural and physical parameters controlling the oxygen reduction reaction selectivity with carboxylic acid-substituted cobalt corroles incorporated in a porous carbon support. *The Journal of Physical Chemistry C*, v. 123, n. 43, p. 26351-26357, 20~019.

Caracterização dos óxidos impregnados TiO₂ e Ag/TiO₂ e avaliação da atividade antimicrobiana

Caroline Zarzeka^{1*} (PG), Jonas Goldoni² (TC), Filomena Marafon² (TC), Margarete Dulce Bagatini² (PQ), Leda Maria Saragiotto Colpini¹ (PQ)

¹Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia Ambiental; Universidade Federal do Paraná (UFPR), Setor Palotina, PR, Brasil

²Universidade Federal da Fronteira Sul (UFFS), Campus Chapecó, SC, Brasil

* carolaine_z@hotmail.com

Palavras Chave: Fotocatálise, Nanomateriais, Nanotecnologia, *Escherichia coli*

Introdução

Os processos oxidativos avançados degradam de forma eficaz, fácil e econômica os poluentes emergentes e bactérias. Estes englobam a fotocatalise heterogênea que alicerça-se na produção de espécies reativas de oxigênio (EROs) produzidos a partir da ativação dos fotocatalisadores pela luz, como o dióxido de titânio (TiO₂). O TiO₂ possui ação antimicrobiana quando fotoativado, gerando EROS que promovem a oxidação de lipídios e a desestruturação da membrana dos organismos (1). Mas, o TiO₂ tem ação fotocatalítica limitada sobre radiação visível e um alto rearranjo dos pares elétron/lacuna, impulsionado assim sua dopagem com a prata (Ag) (2). Esta junção muda a matriz cerâmica e semicondutora do TiO₂, gerando um band gap estreito e amplia a sua capacidade de captação de luz (3). Buscou-se sintetizar os óxidos de Ag/TiO₂, via impregnação por excesso de solvente, caracterizá-los e aplicá-los em estudos de atividade antimicrobiana.

Resultados e discussão

Nesta síntese, o TiO₂ foi dissolvido em água e adicionado AgNO₃ (2 e 10% m/m). A solução foi mantida em evaporador rotativo por 17 horas, em temperatura ambiente. Então, o material foi seco a 80 °C e após calcinado a 400 °C por 5 h. Os catalisadores 2AgT/I (2% Ag/TiO₂), 10AgT/I (10% Ag/TiO₂) e T (TiO₂) foram caracterizados por: Espectroscopia de infravermelho (FT-IR); Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV); Fisissorção de N₂; Difração de raios X (DRX) e Espectroscopia fotoacústica (PAS). A ação antimicrobiana foi realizada com *E. coli* (NEWP0022) sob luz negra (36 W) e escuro. O tempo foi de 0, 5, 10 e 15 minutos. Os FT-IR dos AgT/I tiveram um leve deslocamento dos picos em torno de 660–700 cm⁻¹, indicando a vibração assimétrica da ligação Ti-Ag-O. A micrografia do T teve um aspecto homogêneo e esférico. A dopagem com Ag, formou nos AgT/I aglomerados esponjosos, resultados do processo de agregação. Obteve-se isoterma do tipo II, com materiais mesoporosos. O aumento da concentração de Ag diminui a área específica e volumes de poros, devido ao processo de agregação, promovendo bloqueios parciais dos poros. O DRX do catalisador T teve picos delineados de fase anatase e o 10AgT/I teve picos de

Ag metálica. Das análises de PAS, o menor gap (1,4 eV) foi do 2AgT/I, devido à elevação das falhas na rede do TiO₂, já o gap do 10AgT/I (2,4 eV) foi menor que o T (3 eV). Nos estudos de atividade microbiana, o gráfico 1D, **Figura 1**, teve ação bactericida (10 min), logo sua concentração produz EROS devido as partículas de Ag que acumulam-se próximo às membranas bacterianas, causando extravasamento e morte. No gráfico 2B elevou-se o número de colônias (0-10 min), logo a UV fotoreparou a *E. coli* indicando uma dose subletal. Declinou-se o número de colônias nos gráficos 2B, 2C (15 min) e 2D (5 min), indicando que a luz negra os fotoativou indicando ação antibacteriana, pela maior geração de EROS, superando a fotorreparação da *E. coli*.

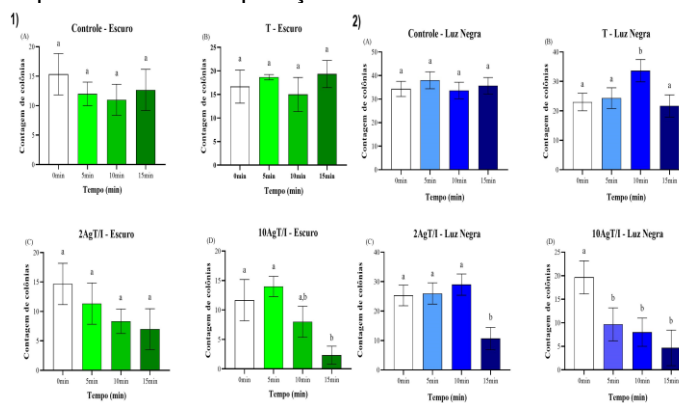


Figura 1. Ação antibacteriana do controle (A) e dos catalisadores T (B), 2AgT/I (C) e 10AgT/I (D) no escuro (1) e sob luz negra (2), variando o tempo 0, 5, 10 e 15 min. Letras iguais indicam não haver significância estatística, letras diferentes indicam p<0,05 (ANOVA de uma via, pós teste Tukey).

Conclusões

Os catalisadores AgT/I tem efeito bactericida e fotocatalítico mais pronunciados comparados ao T, com potenciais aplicações em dispositivos para desinfecção bacteriana.

Referências

- (1) Foster, H. A.; Sheel, D. W.; Evans, P.; Sheel, P.; Varghese, S.; Elfakhri, S. O.; Yates, H. M. Chem. Vap. Depos. **2012**, 18, 140-146.
- (2) Yang, X. H.; Fu, H. T.; Wang, X. C.; Yang, J. L.; Jiang, X. C.; Yu, A. B. J. Nanopar. Res. **2014**, 16, 2526.
- (3) Li, K.; Teng, C.; Wang, S.; Min, Q. Front. Chem. **2021**, 9, 637501.

Au(0)/SnO₂ Nanoparticles with Photocatalytic Properties

Letícia Cristina Modanez* (IC), Daniel Rapachi (PG), Marcos Alexandre Gelesky (PQ)

leticiamodanez@hotmail.com

Laboratory of Catalysis and Chemical Reactors, School of Chemistry and Food, Federal University of Rio Grande, Avenue Itália, km 08, 96201900, Rio Grande, RS, Brazil

Palavras Chave: Dyes, Poluents, Nanoparticles

Introdução

Over the years, nanomaterials have been standing out due to their optical, mechanical, electrical, magnetic, catalytic, electrocatalytic properties, a fact that is mainly due to the morphological properties of nanomaterials, allowing a wide range of applications¹. Among these materials are the semiconductors, which presents an energy difference between the valence and conduction band called "band gap". This band gap can be modified by adding dopants or metals to the solution, causing the electron, when releasing energy, not to return to its initial state, but to the band of the added metal or dopant³.

In the literature, there are several studies on the use of oxides modified with metals as photocatalysts for the degradation of dyes, so this study becomes important since bodies of water contaminated with dyes reduce the passage of solar radiation into the water, reducing the activity of photosynthetic organisms and the solubility of gases, causing changes and imbalance in these ecosystems⁴. Thus, the use of photocatalysts in the presence of radiation generates oxidizing and reducing sites caused by electronic transitions.

Knowing this, the present work aims at the synthesis and characterization of tin oxide (SnO₂) modified with gold nanoparticles (Au(0)), by the sol-gel synthesis method, with potential photocatalytic application.

Resultados e discussão

After synthesis of SnO₂, it was defined that the best condition for calcination is at 600°C. In the characterization, TEM analysis were used, where it was possible to analyze that the average size of SnO₂ is 32 ± 9 nm and tetragonal crystalline structure of the rutile type. For the photocatalyst containing Au(0), it was possible to identify the plasmonic resonance band, which occurred close to 548 nm, indicating an approximate Au nanoparticle size of 50 nm².

For the photocatalytic test, 4 ppm of methylene blue and 100mg of the photocatalyst were added. The test was

carried out in the presence of UV light, removing a 5mL aliquot every 5 minutes for 100 minutes.

During the test, it is possible to notice a change in the color of the solution. The tests were carried out using SnO₂ and Au(0)/SnO₂ photocatalysts. It was observed that both photocatalysts were active in the degradation of methylene blue. Using SnO₂, it was observed that in 40 minutes of reaction the degradation of the dye was 93.44%, and for the Au(0) photocatalyst it was 77.87%. It is noted that the degradation of the dye was greater when compared to the degradation carried out without the presence of the photocatalyst (40 minutes, 65.94%), indicating that the synthesized photocatalysts were active for methylene blue degradation.

Conclusões

After this study, it is possible to see that both SnO₂ and Au(0)/SnO₂ have good photocatalytic application, with SnO₂ being more efficient for the degradation of methylene blue, since, in its presence, the pollutant degrades more quickly.

Agradecimentos

I would like to thank FURG and all the insitucional bodies involved in this present work, as well.

Referencias e notas

- (1) AITKEN, Rod J. et al. Occupational medicine, v. 56, n. 5, p. 300-306, 2006.
- (2) HUANG, Xiaohua; EL-SAYED, Mostafa A. Journal of advanced research, v. 1, p. 13-28, 2010.
- (3) BACCARO, Alexandre; GUTZ, IVano. Quim. Nova, v. 41, n. 3, p. 326-339, 2018.
- (4) ZANONI, M.V.B; CARNEIRO, P.A. Ciência Hoje, v. 29, n. 174, p. 61-64, 2001.

Fotofísica e propriedades fotobiológicas de fluorenil-corróis

Bruna M. Rodrigues (IC)¹, Bernardo Almeida Iglesias (PQ)¹. matiuzzirodrigues@gmail.com

¹Laboratório de Bioinorgânica e Materiais Porfirínicos, Departamento de Química, CCNE, UFSM, Santa Maria, RS 97105-900, Brasil

Palavras Chave: Corróis, Fotofísica, Fotobiologia.

Introdução

Corróis são compostos formados por unidades de pirrol e semelhantes às porfirinas. Sua diferença estrutural encontra-se na ausência de um carbono na posição *meso*, o que ocasiona em uma ligação direta entre duas unidades de pirrol.¹ A ligação direta pirrol-pirrol propicia aos corróis propriedades eletrônicas únicas e com aplicações notáveis em catálise, medicina, conversão de energia solar, aplicações ópticas e de detecção.² Dependendo de seus substituintes, estes compostos podem apresentar boa foto-estabilidade, alto rendimento de produção de espécies reativas de oxigênio (ERO) e interação com biomoléculas.³

Resultados e discussão

Os corróis mono-fluorenil e tris-fluorenil-corrol foram sintetizados de acordo com a literatura.^{4,5}

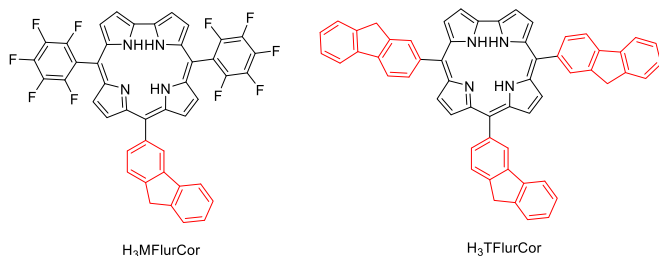


Figura 1. Representação estrutural dos fluorenil-corróis utilizados neste estudo.

Os derivados contendo as unidades fluorenil foram submetidos a ensaios de absorção e emissão com diferentes solventes (DCM, ACN, MeOH, DMSO e DMSO 5%/Tris-HCl pH 7.4), teste de foto-estabilidade, formação de EROs (oxigênio singlete e superóxido). Os compostos também foram submetidos a ensaios com biomoléculas (DNA e BSA) para aplicações fotobiológicas.

Conclusões

Os compostos aqui estudados apresentaram resultados satisfatórios quanto as propriedades fotofísicas, bem

como geração de EROs e de interação com biomoléculas.

Agradecimentos

Os autores agradecem a CAPES, CNPq e FAPERGS, pelo apoio financeiro.

Referencias e notas

- (1) Gross, Z., Galili, N., & Saltsman, I. *Angewandte Chemie International Edition*, 1999, 38, 1427- 1429.
- (2) Yadav, O., Varshney, A., Kumar, A., Ratnesh, R. K., & Mehata, M. S. (2018). A2B corroles: Fluorescence signaling systems for sensing fluoride ions. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 202, 207-213.
- (3) OKUN, Z. et al. Cellular Uptake and Organ Accumulation of Amphipolar Metallocorroles with Cytoprotective and Cytotoxic Properties. *Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry*, v. 11, n. 4, p. 380–384, 2023.
- (4) OELMANN, J. et al. Biometal Corrole Active Esters and Their Amino Acid and Peptide Conjugates. *European Journal of Inorganic Chemistry*, v. 2020, n. 32, p. 3059–3069, 9 jul. 2020.
- (5) HONIG, Hilah C. et al. Structural and physical parameters controlling the oxygen reduction reaction selectivity with carboxylic acid-substituted cobalt corroles incorporated in a porous carbon support. *The Journal of Physical Chemistry C*, v. 123, n. 43, p. 26351-26357, 2019.

Determinação das propriedades fotofísicas de aril-triazenos com possível aplicação em química de sensores

Jenifer L.O. da Rosa (IC)^{a*}, e Bernardo A. Iglesias (PQ)^a jenifer.rosa@acad.ufsm.br

^aLaboratório de Bioinorgânica e Materiais Porfirínicos – LBMP, Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria CEP 97105-900, RS, Brasil.

Palavras Chave: Triazenos, Sensores, UV-Vis, Fluorescência

Introdução

Os derivados de triazenos podem ser entendidos como os compostos que tem como grupo funcional -N(H)-N=N-, sendo que o mesmo pode ser versátil e possuir diversas aplicações, principalmente na química de coordenação e de interação com biomoléculas¹⁻²

Resultados e discussão

Neste trabalho foi explorado as propriedades fotofísicas do 1,4-bis(fenil)triazeno, frente a solventes de diferentes polaridades, como DCM, MeOH, ACN, THF, 1,4-Diox, acetato de etila, DMF e DMSO, para determinação suas propriedades de agregação, absorção e emissão de fluorescência. Levando em consideração os estudos iniciais destas propriedades, também foi realizado um estudo de agregação em meio aquoso, variando-se a fração molar de água (0-90%) em solução de ACN. Para o estudo como sensor, foram avaliadas as características do 1,4-bis(fenil)triazeno frente a diferentes cátions, visando sua promissora possibilidade de sua utilização como sensor, principalmente na detecção dos cátions Hg²⁺ e Cu²⁺

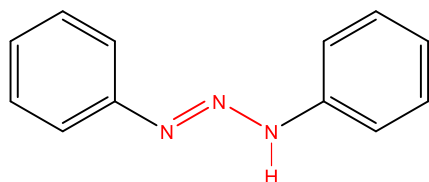


Figura 1. Representação estrutural do 1,4-bis(fenil)triazeno utilizado neste estudo.

Conclusões

De acordo com os resultados obtidos, o aril-triazeno apenas com os grupos fenila apresentou propriedades fotofísicas interessantes nos solventes utilizados, emitindo fluorescência e propriedades solvatocrômicas principalmente em solvente mais polares. Os valores dos limites de detecção (LOD) e de quantificação (LOQ) foram determinados por absorção e emissão de fluorescência, apresentando alterações na transição $n \rightarrow \pi^*$ do grupo triazeno e supressão de fluorescência. A respeito da estequiometria de interação (Job Plot) os dados obtidos evidenciam uma relação 2:1 de ligante:cátion, para as espécies de Hg²⁺ e Cu²⁺.

Agradecimentos

Os autores agradecem os financiamentos e apoio da CAPES, CNPq e FAPERGS.

Referencias e notas

- (1) M. Horner, G.M. de Oliveira, J.A. Naue, J. Daniels, J. Beck J. Organomet. Chem., 691 (2006), 1051. Figueirêdo, P.d.M., Sampaio Filho, J.C., Sodré, A.d.J. et al. Sci Rep 11, 2541 (2021).

Síntese, caracterizações e interações com DNA de complexos zwitteriônicos de dioxidovanádio(V) derivados de ligantes imínicos contendo trifenilfosfônio

Francisco M. Martins^{1,*} (PG), Bernardo A. Iglesias² (PQ), Otávio A. Chaves (PG)³, Davi F. Back¹ (PQ)
*chicomartins@gmail.com

1 Laboratório de Materiais Inorgânicos, Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), RS

2 Laboratório de Bioinorgânica e Materiais Porfirínicos, Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), RS

3 Centro de Química de Coimbra, Departamento de Química, Universidade de Coimbra, Portugal

Palavras Chave: Complexos, Vanádio(V), Trifenilfosfônio, Interações, DNA, Docking

Introdução

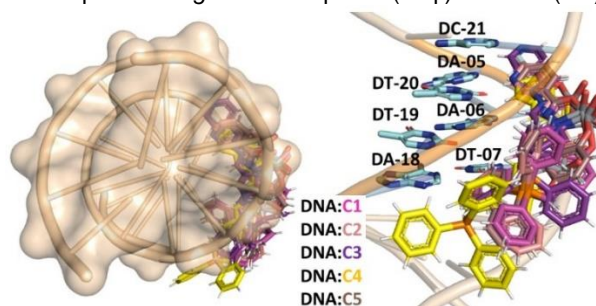
Interações não-covalentes com ácido desoxirribonucleico (DNA) é um dos mecanismos pelos quais compostos de coordenação apresentam atividades antineoplásicas¹. No desenvolvimento de novos compostos, incluindo aqueles contendo vanádio², que apresentem tais interações e possíveis efeitos antineoplásicos, o direcionamento mitocondrial pode aumentar a eficiência das suas atividades terapêuticas, uma vez que mitocôndrias são organelas que regulam e desencadeiam processos intrínsecos da apoptose³. Para tanto, uma das estratégias para esse direcionamento mitocondrial é incorporação de grupos catiônicos trifenilfosfônio^{3,4}. Assim, este trabalho objetiva sintetizar complexos de dioxidovanádio(V) derivados de hidrazidas aromáticas e aldeído contendo grupos alquiltrifenilfosfônio e avaliar as suas interações com DNA por métodos experimentais e computacionais.

Resultados e discussão

Cinco complexos zwitteriônicos (sem contraíons) derivados de cinco hidrazidas aromáticas foram caracterizados por difração de raios X em monocristal. **C1–C5** apresentam íons de vanádio(V) coordenados a oxigênios fenolato e enolato e a nitrogênio imínico (ligante O,N,O) e a dois ligantes óxido, estabilizando tais íons como espécies pentacoordenadas *cis*-dioxidovanádio(V). As interações de **C1–C5** com DNA de timo de carneiro (CT-DNA) foram avaliadas por espectroscopia de absorção UV-Vis. Ao adicionar alíquotas de CT-DNA ao complexo, visualizou-se um aumento na absorção (efeito hipercrômico) da banda dos complexos, o que indica interações não-covalentes com DNA. Ainda, não foram observadas mudanças de comprimento de onda de absorção (efeitos bato ou hipsocrômicos). Os valores de constante de ligação (K_b , 10^4) são iguais a $3,84 \pm 0,02$ (**C1**), $7,56 \pm 0,14$ (**C2**), $5,18 \pm 0,32$ (**C3**), $4,42 \pm 0,58$ (**C4**) e $3,05 \pm 0,26$ (**C5**) M^{-1} .

Tais valores (ordem de $10^{-4} M^{-1}$) indicam capacidades moderadas de interação, com maior valor para **C2** (derivado de hidrazida nicotínica). Avaliaram-se também essas interações por estudos computacionais de *docking* molecular, que indicam uma preferência de **C1–C5** pelos sulcos menores do DNA (**Figura 1**) e que tais interações ocorrem por forças de van der Waals.

Figura 1. Sobreposição de interações DNA:**C1–C5** em sulco menor por *docking*. Visões superior (esq.) e frontal (dir.).



Conclusões

Cinco complexos de dioxidovanádio(V) (**C1–C5**) foram sintetizados e totalmente caracterizados de forma a elucidar suas estruturas. Ainda, evidenciou-se que tais complexos interagem com DNA de forma moderada e pelos seus sulcos menores.

Agradecimentos

UFSM, CNPq, CAPES e FAPERGS

Referencias e notas

- (1) Kellet, A.; Molphy, Z.; Slator, C.; McKee, V.; Farrell, N. P. *Chem. Soc. Rev.* **2019**, 48, 971.
- (2) Fioravanço, L. P.; Pôrto, J. B.; Martins, F. M.; Siqueira, J. D.; Iglesias, B. A.; Rodrigues, B. M.; Chaves, O. A.; Back, D. F. *J. Inorg. Biochem.* **2023**, 239, 112070.
- (3) Liu, Y.; Song, X.-Q.; Li, S.-T.; Liu, X.; Tian, J.-L.; Xu, J.-Y.; Yan, S.-P. *Appl. Organometal. Chem.* **2019**, 33, e4920.
- (4) Chew, S. T.; Lo, K. M.; Sinniah, S. K.; Sim, K. S.; Tan, K. W. *RSC Adv.* **2014**, 4, 61232.

Síntese, caracterização e avaliação do perfil antifúngico contra *Sporothrix brasiliensis* de um novo complexo de Cu(II) contendo ligante naftolato-imina

Thaís C. Vann (PG)¹, Ianka J. Nunes (PG)¹, Stefanie B. Waller (PQ)², Marlete B. Cleff (PQ)², Osvaldo de L. Casagrande Jr. (PQ)³, Márcia K. Ripoll (PQ)², Renata Osório de Faria (PQ)², Angelita dos Reis Gomes (PQ)², Paula Priscila C. da Costa (PQ)¹, Adriana C. Pinheiro (PQ)^{1*}

*acpinheiro@ufpel.edu.br

¹Grupo de Catálise e Estudos Teóricos – Universidade Federal de Pelotas

²Programa de Pós-Graduação em Ciências Veterinárias – Universidade Federal de Pelotas

³Laboratório de catálise Molecular – Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Palavras Chave: (Complexos de Cu(II), ligantes naftol-imina, antifúngico, inorgânica medicinal)

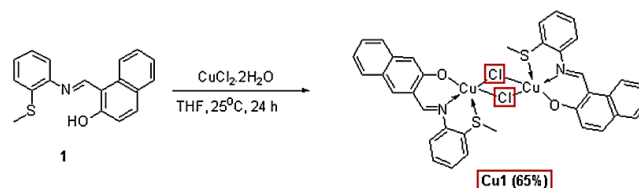
Introdução

Complexos de Cu(II) apresentam interesse como potenciais agentes antimicrobianos, antivirais, anti-inflamatórios, antitumorais, inibidores de enzimas ou nucleases químicas [1]. Pesquisas recentes em microbiologia demonstram o potencial desses compostos [2]. O efeito biocida do cobre em uma ampla gama de patógenos, como bactérias, fungos e vírus, tem sido demonstrado por muitos estudos [3]. Em contraste com o efeito antibacteriano, a capacidade antifúngica do cobre não tem sido amplamente explorada. Ainda, bases de Schiff são uma importante classe de compostos orgânicos. Sendo interessantes por apresentarem elevada atividade biológica, atuando como inibidora antibacteriana e antifúngica. As bases de Schiff têm sido amplamente utilizadas como ligantes devido à alta estabilidade dos compostos de coordenação.

Desta forma, nesse trabalho descrevemos a síntese, caracterização e avaliação do perfil de suscetibilidade antifúngica de *Sporothrix brasiliensis* isolados clinicamente de cães e gatos com esporotricose.

Resultados e discussão

O pré-ligante naftol-imina (**1**) com grupo doador S pendente foi prontamente sintetizado por condensação de base de Schiff entre a amina primária e o correspondente 2-hidroxi-1-naftaldeído em refluxo de metanol. A reação de CuCl₂·2H₂O com quantidade equimolar de **1**, produziu após 24h, à 25 °C, o correspondente complexo de cobre **Cu1**. **Cu1** foi isolado como sólido marrom com rendimento de 65% (**Esquema 1**). O complexo foi caracterizado por difração de raios X de monocristal, IV, UV-Vis, ESI. Estudos de estabilidade em solução estão em andamento.



Esquema 1. Rota geral de síntese do complexo de Cu(II) contendo ligante naftolato-imina **1**.

Cu1 foi avaliado quanto a atividade fungistática e fungicida contra de cepas de *Sporothrix brasiliensis*. O complexo apresentou atividade contra todos os gêneros fúngicos testados, com boa ação fungistática (CIM de 62,3 a 1000 µg/ml), embora maiores valores tenham sido necessários para conferir ação fungicida (CFM de 125 a 1000 µg/ml). Estudos de mecanismo de ação do composto em cepa de *Sporothrix brasiliensis* estão em andamento.

Conclusões

Um novo complexo de Cu(II) foi sintetizado e caracterizado. O complexo apresentou atividade antifúngica e antifungistática contra *S. Brasiliensis*.

Agradecimentos

CNPQ, FAPERGS, PPGQ/UFPel.

Referencias e notas

- (1) Cheff, D. M.; e Hall, M. D. *J. medicinal chemistry*. **2017**, 10, 82.
- (2) Sumalatha, V. Sreenu, D. Rambabu, A. Ramesh, S. Kavadi. *J. Pre-proof*. **2021**, 1229, 129-606.
- (3) Chellain E S. Raj. *J. Het. Chem*. **2021**, 58, 928-941.

Desenvolvimento de microestruturas de compostos de coordenação encapsulados em quitosana

Thomas Pereira (IC)^{1*}, Edinara Luiz (PG)¹, Mariele Paludetto (PG)¹, Alexandre Luis Parize (PQ)¹, Rosely Peralta (PQ)¹,

*s.pereira@grad.ufsc.br

¹ Departamento de Química, UFSC, Florianópolis, Santa Catarina, Brasil

Palavras Chave: *microencapsulação, compostos de coordenação, nanopartículas de quitosana, complexos binucleares, drug delivery.*

Introdução

Nos últimos anos, complexos bioinspirados em metalohidrolases e de metalonucleases vêm demonstrando bons resultados na hidrólise de ésteres de fosfato, viabilizando sua aplicação como fármacos contra o câncer, atuando na degradação de DNA de células tumorais¹. Contudo, a absorção, seletividade e a distribuição desses compostos em locais específicos do corpo são, ainda, grandes desafios para sua aplicação em larga escala. Assim, o uso de polímeros biocompatíveis para o encapsulamento desses complexos, é uma alternativa para promover sua liberação controlada em determinadas condições. Portanto, neste trabalho, dois complexos Mn^{II}Mn^{III} (**1**) e Mn^{II}Fe^{III} (**2**)², foram encapsulados em quitosana (**1a** e **2a**), para avaliar seu potencial uso em um sistema tipo “drug delivery”.

Resultados e discussão

O processo de encapsulamento foi feito utilizando quitosana como biopolímero, Pluronic F127 como surfactante e como tripolifosfato de sódio como reticulante aniônico. A obtenção das nanopartículas foi confirmada por análise de microscopia eletrônica de transmissão (TEM) (Figura 1) mostrando partículas esféricas característica da quitosana reticulada. A presença dos complexos no material foi corroborada por análise de espectrofotometria na região UV-Vis, que apresenta bandas características dos compostos de coordenação, assim como sinais referentes a Mn^{II} na ressonância paramagnética eletrônica.

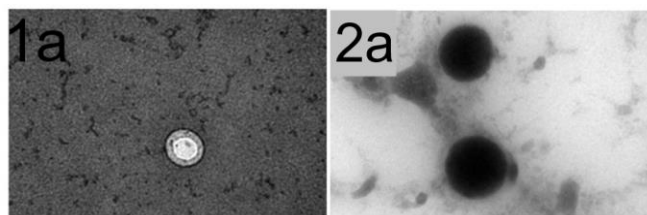


Figura 1. Imagens de TEM, 100 nm, das partículas **1a** e **2a**.

Os tamanhos de partículas determinados por espalhamento dinâmico de luz (Tabela 1), concorda com o encontrado via TEM e se mostrou estável ao longo dos dias. Os valores de potencial zeta, maiores que 30 mV, também indicam um sistema estável³.

Tabela 1. Diâmetro médio e potencial zeta das nanopartículas.

Partícula	Diâmetro médio	Potencial Zeta
1a	455 nm	56,3 mV
2a	277 nm	53,5 mV

Pode-se verificar, por calorimetria diferencial, a alteração na entalpia de fusão das nanopartículas em comparação com os complexos, indicando a diminuição na cristalinidade, devido à alteração estrutural causada pelo encapsulamento.

A abertura das nanopartículas foi conduzida em uma solução tampão PBS durante 5 dias, resultando na liberação de 22% e 20% dos complexos encapsulados **1** e **2**, respectivamente.

Conclusões

Foram obtidas duas nanopartículas de quitosana, contendo compostos de coordenação encapsulados em seu interior. Os materiais foram caracterizados por diversas técnicas e se mostraram estáveis e aumentaram a solubilidade dos compostos em aquosa. Ensaios de liberação sugerem a abertura da nanopartícula de quitosana em solução tampão, resultado do inchaço em meio aquoso. Futuramente ensaios para avaliar a atividade hidrolítica destes materiais serão realizados.

Agradecimentos

A UFSC, CNPq, CAPES e INCT-Catálise.

Referências e notas

- (1) PEREIRA, C. et al. JBIC, **2019**, v. 24, n. 5, p. 675-691,
- (2) LUIZ, E. et al. J. Inorg. Biochem. **2022**, 236, 111965
- (3) AVADI, M et al. Nanomedicine: NBM **2010**, 6, 63.

Síntese e caracterização de nanopartículas de ouro no desenvolvimento de filmes biopoliméricos 3D-impresos

Júlia Lazzarini Machado¹ (IC), Marcelo Pereira² (PQ), Monique Deon¹ (PQ)

julia.machado@ufcspa.edu.br; marcelo.barbalho@ufrgs.br; monique.deon@ufcspa.edu.br

¹Grupo de Pesquisa em NanoBio Interfaces, Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre, Porto Alegre - RS, 90050-170.

²Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Agronomia, Porto Alegre - RS, 90650-001.

Palavras Chave: Nanotecnologia. Hidrogéis. Materiais antimicrobianos. Impressão 3D.

Introdução

A nanotecnologia permite manipular racionalmente e estruturas atômicas ou moleculares e alcançar propriedades físico-químicas únicas, diferentes do *bulk*. O ouro na escala nanométrica apresenta propriedades antimicrobianas, e seu potencial terapêutico pode ser explorado em diversas formas 3D. Este trabalho visou sintetizar e caracterizar nanopartículas de ouro (AuNP) para incorporação em matrizes poliméricas aptas à impressão 3D.

Resultados e discussão

A Fig. 1 apresenta o processo de síntese de AuNPs e preparo das tintas para impressão 3D.

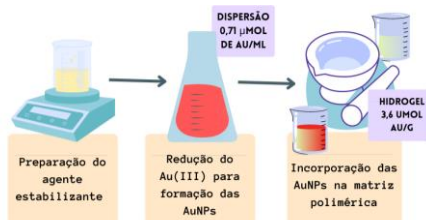


Figura 1. Esquema do processo de obtenção de AuNPs e da respectiva tinta nanocompósito para impressão 3D.

As AuNPs foram caracterizadas por espectroscopia na região do UV-Vis e os espectros obtidos (Fig. 2) apresentaram uma banda de ressonância plasmônica em 520 nm, característica de AuNPs de formato esférico e tamanho menor que 10 nm¹. As imagens de microscopia eletrônica de transmissão (TEM) corroboraram este resultado.

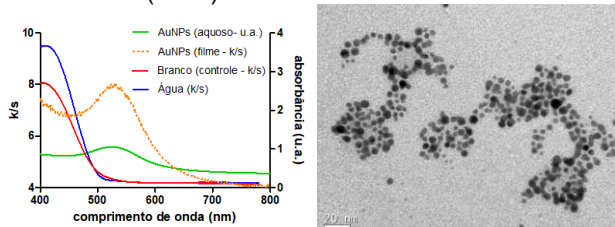


Figura 2. Espectros na região do UV-Vis de AuNPs e dos filmes 3D-impresos; e imagem de TEM de AuNPs.

Hidrogéis nanocompósitos de goma guar/quitosana contendo AuNPs foram utilizados como tinta para impressão 3D de filmes de 20x20x1,5 mm (Fig. 3). Após secos, os filmes apresentam massa média de 104 mg e conteúdo de Au de 3,6 µg/filme. A presença de AuNPs nos filmes foi evidenciada pela banda característica em 520 nm nos espectros obtidos por refletância difusa (Fig. 2).

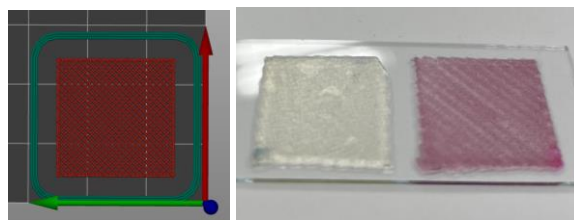


Figura 3. Esboço para impressão 3D e fotografia dos filmes 3D impresos sem e com AuNPs.

O índice de inchamento dos filmes foi de 336%, destacando-se que os mesmos mantêm sua forma e integridade por, pelo menos, 60 min quando em contato com água.

Conclusões

AuNPs foram sintetizadas e incorporadas eficientemente em hidrogéis de biopolímeros, aptos à impressão 3D. Filmes nanocompósitos impresos em 3D foram obtidos e são promissores no desenvolvimento de formulações nanotecnológicas antimicrobianas com vistas à aplicação tópica.

Agradecimentos

As autoras agradecem às agências de fomento, CNPQ e FAPERGS, e à UFCSPA pelo apoio e financiamento.

Referências e notas

- (1) NJOKI, P. N. *et al. J Phys Chem C*, 2007, 111, 40, 14664–14669.

Novo complexo tetranuclear de cobre(II) para hidrólise de triéster de fosfato

Edinara Luiz^{1*}(PG), Thomas Pereira¹(IC), Fernando R. Xavier²(PQ), Rosely A. Peralta¹(PQ),

*edinara.l Luiz@posgrad.ufsc.br

¹Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC, Florianópolis/SC, Brasil.²Universidade do Estado de Santa Catarina – UDESC, Joinville/SC, Brasil.

Palavras Chave: Complexo de cobre; hidrólise de triéster de fosfato, estudos cinéticos, complexos bioinspirados, benzoimidazol.

Introdução

Os organofosfatos são amplamente utilizados como agroquímicos, porém sua alta toxicidade está principalmente relacionada à inibição de uma enzima chamada acetilcolinesterase.[1] Até o momento, o tratamento da contaminação por pesticidas envolve a quebra das ligações P-O. Nesse contexto, complexos metálicos têm demonstrado eficácia, com o cobre se destacando devido à sua importância biológica e presença em algumas metalohidrolases.[2] Com isso em mente, sintetizou-se um ligante completamente caracterizado e inédito, que foi utilizado para obter um complexo de cobre tetranuclear com atividade hidrolítica.

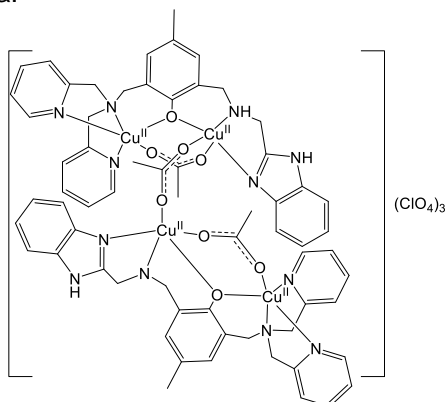


Figura 1. Estrutura do complexo.

Resultados e discussão

A análise elementar revelou a presença de um complexo de cobre tetranuclear, contendo duas unidades do composto orgânico, três pontes de acetato e três percloratos como contraíons. Além disso, a estrutura inclui duas unidades de água de recristalização. A partir dos espectros infravermelhos, é possível identificar as vibrações atribuídas ao ligante, como C=C, C=N e vibração aromática C-H. Também é evidente uma banda intensa a 1077 cm⁻¹, relacionada à vibração Cl-O, decorrente do contraíon do complexo catiônico. A diferença entre as vibrações simétricas e assimétricas do grupo acetato (1440 e 1542 cm⁻¹, respectivamente) sugere que esse grupo atua como

uma ponte entre os centros de cobre. O experimento de condutividade (359,90 Ω⁻¹ cm² mol⁻¹) confirma uma proporção de eletrólitos de 1:3, indicando um complexo catiônico com três percloratos. Os espectros de UV-Vis apresentam duas transições intrametálicas a 686 nm e 408 nm, associadas à transição d-d. Esses são alguns dos resultados obtidos até o momento. Por fim, ensaios cinéticos para a degradação de fosfato triéster mostraram atividade em pH básico ($V_{\max} = 6,67 \times 10^{-9}$ mol L⁻¹s⁻¹; $K_M = 2,39 \times 10^{-3}$ mol L⁻¹; $k_{\text{cat}} = 5,56 \times 10^{-5}$ s⁻¹, $k_{\text{cat}}/K_M = 0,02$ L mol⁻¹ s⁻¹).

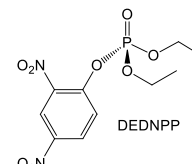
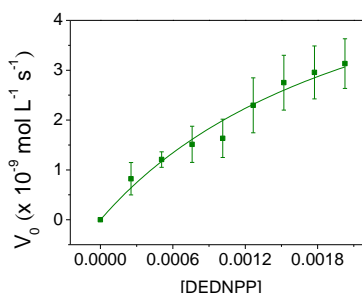


Figura 2. Cinética do efeito de variação de [DEDNPP] em pH 9,5, utilizando o complexo como catalisador, e estrutura do substrato (a direita).

Conclusões

Neste trabalho foram sintetizados um novo ligante, contendo benzoimidazol e um complexo tetranuclear de Cu(II). Ambos foram caracterizados por diversas técnicas e o complexo apresentou atividade na hidrólise de ligações P-O em um triéster de fosfato (DEDNPP).

Agradecimentos

Os autores agradecem a: UFSC, PPGQMC, CNPq, CAPES (Finance Code 001), CAPES-PrInt, INCT-Catálise,

Referências e notas

- [1] M.C. de Koning, et. al. *Chemico-Biological Interactions*. 326 (2020) 109139.
[2] U.C. Okeke, et, al. *Inorganic Chemistry Communications*. 102 (2019) 45–50.

Uso de imidazo(lapachona)corrol como sensor de biomoléculas

Sarah Giesel (IC)^{a*}, Bruna M. Rodrigues (IC)^a, Esther R.S. Paz (PG)^b, Eufrânio N. da Silva Júnior (PQ)^b e Bernardo A. Iglesias (PQ)^a giesel.sarah@acad.ufsm.br

^aLaboratório de Bioinorgânica e Materiais Porfirínicos – LBMP, Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria CEP 97105-900, RS, Brasil.

^bDepartamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte CEP 31270-901, MG, Brasil.

Palavras Chave: Corróis, Sensores, UV-Vis, Fluorescência

Introdução

Corróis são macrociclos tetrapirrólicos dentro da classe das porfirinas comumente usadas como sensibilizadores em terapia fotodinâmica (PDT) e terapia fotodinâmica antimicrobiana (aPDT). Os compostos macrocíclicos com propriedades fluorescentes são ferramentas indispensáveis para uma ampla gama de aplicações, dentre elas, como sensores fluorescentes, OLEDs e estudos de bioimagem¹⁻³.

Resultados e discussão

Neste estudo, inicialmente foram testadas frações molares de água (0% a 90%) em solução de acetonitrila (MeCN), etanol (EtOH) e dimetil sulfoxido (DMSO) para avaliar fenômenos de agregação induzidos pela presença de água, bem como de avaliar a melhor proporção solvente:água para os estudos com as biomoléculas. Para os ensaios de titulação foram escolhidas as biomoléculas DNA (ácido desoxirribonucleico), HSA (albumina sérica humana) e BSA (albumina sérica bovina). As medidas foram conduzidas por espectroscopia na região do UV-Vis e por emissão de fluorescência. Foi feita uma solução estoque do corrol em cada solvente (100 µM) e de cada biomolécula em solução tampão PBS pH 7.4 (100 µM). As titulações com as biomoléculas medidas por absorção e por emissão foram na faixa de 0 a 120 µM.

Conclusões

De acordo com os resultados obtidos, o corrol estudado apresentou um comportamento muito similar na mistura dos solventes utilizados com água. Uma maior afinidade pelas proteínas (HSA e BSA). Valores dos limites de detecção (LOD) e de quantificação (LOQ), bem como a respeito da estequiometria de interação (Job Plot) estão sendo conduzidos e finalizados.

Agradecimentos

Os autores agradecem os financiamentos e apoio da CAPES, CNPq, FAPERGS e FAPEMIG.

Referencias e notas

- (1) Rodrigues, B.M.; et. al. *RSC Adv.*, **2023**, 13, 11121–11129.
- (2) Gryko, D.T.; et. al., *J. Org. Chem.*, **2001**, 66, 4267
- (3) De Souza, V.B.; et. al., *Molecules*, **2023**, 28, 1385.

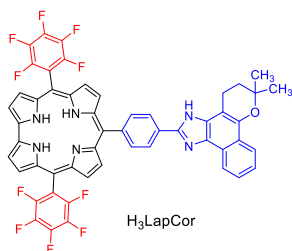


Figura 1. Representação estrutural do imidazo(lapachona)corrol **H₃LapCor** utilizado nos estudos.

Nanocarreadores à base de sílica para encapsulação do antibiótico levofloxacino

Eduardo Guimarães Oliveira de Lima^{1*} (IC), Edilson Valmir Benvenuti² (PQ), Monique Deon^{1,2} (PQ)

* eduardo.lima@ufcspa.edu.br

¹Grupo de Pesquisa em NanoBio Interfaces, Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre – RS – Brasil

²Laboratório de Sólidos e Superfícies, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre – RS – Brasil

Palavras Chave: Nanocarreador inorgânico, Nanopartículas, Liberação de fármacos, Antimicrobianos

Introdução

Nanopartículas de sílica mesoporosa (MSN) são estruturas com poros ordenados, de 2 a 6 nm, com elevada área de superfície e volume de poros. A estrutura porosa aliada à estabilidade biofísico-química da sílica tornam as MSN excelentes nanocarreadores para liberação local e controlada de fármacos, potencializando sua ação farmacológica¹. Esse trabalho visou sintetizar MSN para encapsulação de levofloxacino (LVF), um antibiótico de amplo espectro com propensão à resistência microbiana.

Resultados e discussão

O processo de síntese de MSN e encapsulação do fármaco LVF está ilustrado na Fig. 1.

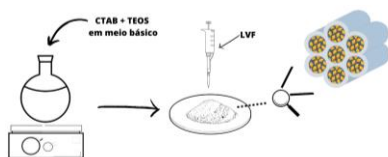


Figura 1. Ilustração do processo de síntese de MSN e encapsulação do LVF.

A obtenção de MSN foi inicialmente avaliada por espectroscopia na região do infravermelho (FTIR); (Fig. 2), observando-se bandas características da rede de sílica, bem como a ausência de bandas relativas ao surfactante CTAB, confirmando sua eliminação por calcinação.

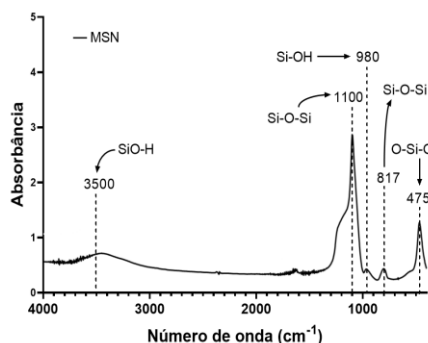


Figura 2. Espectro de FTIR da MSN sintetizada.

As isotermas de adsorção e dessorção de N₂

(Fig. 3) indicaram inflexão na região de P/P₀ entre 0,2 e 0,3, típicas de materiais com poros cilíndricos na faixa de 2 nm, confirmando a obtenção de um material poroso nanoestruturado.

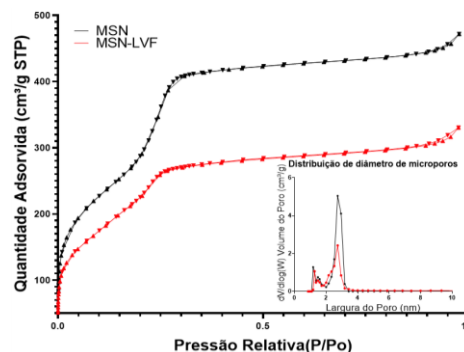


Figura 3. Isotermas de adsorção e dessorção de N₂ e distribuição de diâmetro de poros pelo método DFT.

Após a incorporação do LVF, notou-se diminuição da área superficial (de 1322 para 894 m²g⁻¹) e do volume de poros (de 0,599 para 0,412 cm³g⁻¹) no material MSN-LVF, assim confirmando a presença do fármaco nos poros da MSN.

Conclusões

Nanocarreadores à base de sílica foram sintetizados com sucesso e o fármaco LVF foi eficientemente encapsulado nos poros nanométricos da MSN. O material MSN-LVF é promissor para o desenvolvimento de formulações nanotecnológicas antimicrobianas que possam aumentar a eficiência farmacológica do antibiótico.

Agradecimentos

Os autores agradecem as agências de fomento, CNPQ e FAPERGS, e à UFCSPA pelo apoio, bolsa PIC e financiamento.

Referências e notas

(1) ÁLVAREZ, Elena et al. Nanoantibiotics Based in Mesoporous Silica Nanoparticles: New Formulations for Bacterial Infection Treatment. *Pharmaceutics*, v. 13, n. 12, p. 2033, 2021.

Síntese, caracterização e estudos de estabilidade em solução de novos complexos de Co(II) contendo ligantes fenolato-imina com grupos doadores N de amina pendente

Nathalia S. de Oliveira (PG)¹, Wesley V. Ferreira (PG)¹, Renieidy Flávia C. Dias (PG)², Osvaldo de L. Casagrande Jr. (PQ)³, Adriana C. Pinheiro (PQ)^{1*}

¹Grupo de Catálise e Estudos Teóricos – Universidade Federal de Pelotas

²Programa de Pós-graduação em Química – Universidade Federal de Uberlândia

³Laboratório de catálise Molecular – Universidade Federal do Rio Grande do Sul

*natholiveira95@gmail.com

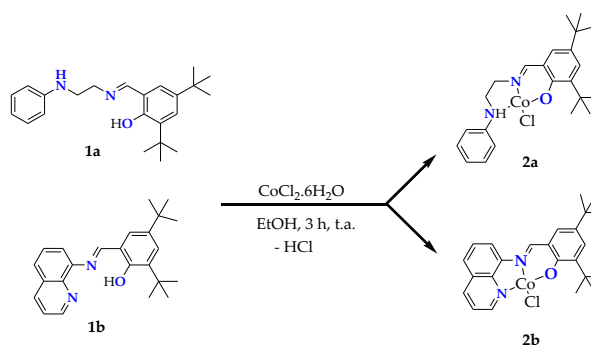
Palavras Chave: Complexos de Co(II), bases de Schiff.

Introdução

Co(II) tem se destacado como um elemento versátil na formação de compostos de coordenação com diversos ligantes, e entre eles, ligantes bases de Schiff [1]. Complexos de Co(II) contendo ligantes bases de Schiff apresentam ampla aplicação na química medicinal. Nosso grupo de pesquisa, vem investigando a síntese, caracterização e avaliação antitumoral de compostos de coordenação contendo centros metálicos bioessenciais. Recentemente publicamos compostos de Cu(II) contendo os ligantes **1a** e **1b**, os quais demonstraram alta citotoxicidade em células tumorais de câncer de mama e corretal [2]. Neste trabalho, exploraremos a síntese e caracterização de dois novos complexos de Co(II) contendo ligantes tridentados bases de Schiff **1a** e **1b**. Esses compostos foram projetados visando ampliar os nossos estudos e suas aplicações como agentes antitumorais.

Resultados e discussão

Os pré-ligantes tridentados fenolato-imina (**1a**, **b**) com grupos pendentes N-doadores foram obtidos por condensação entre a amina primária correspondente e 2,4-di-terc-butilsalicilaldeído. **1a** e **1b** foram obtidos com bons rendimentos (82 e 86%, respectivamente). Caracterização por espectroscopia de RMN de ¹H e ¹³C confirmou a obtenção dos dois compostos. A reação equimolar de **1a** e **1b** com CoCl₂·6H₂O em etanol durante 3 h à temperatura ambiente produziu dois novos complexos de Co(II) como sólidos marrom (**2a**, **b**) e com rendimentos de 96% e 82%, respectivamente (**Esquema 1**). Estes complexos são solúveis em solventes orgânicos comuns, tais como THF, etanol, metanol e éter etílico à temperatura ambiente. Ambos, **2a** e **2b** apresentaram baixa solubilidade em solução



Esquema 1. Rota geral de síntese dos complexos de Co(II).

Os complexos **2a** e **2b** foram caracterizados por espectroscopia de UV-vis. Estudos e estabilidade em solução aquosa, DMSO e PBS estão em andamento, assim como, caracterização por IV, ESI-MS e CHN.

Conclusões

Dois novos complexos de cobalto(II) contendo ligantes tridentados fenolato-imina foram sintetizados. Os complexos foram obtidos com bons rendimentos, chegando a 96%.

Agradecimentos

Agradecemos o apoio do CNPQ, FAPERGS e PPGQ/UFPel, FAPEMIG.

Referências e notas

- (1) J. -H. Jiang, et al. Inorg. Chem. Commun. 127, 2021, 108350.
- (2) Pinheiro, A. C. et al. Pharmaceutics, 15, 2023, 376.

Síntese, caracterização e estudo de estabilidade de nanopartículas de prata verdes reduzidas com dois diferentes dissacarídeos

Rita de Cássia dos Reis Schmidt¹ (PG)*, Monique Deon¹ (PQ)

ritars@ufcspa.edu.br

¹ Grupo de Pesquisa em NanoBio Interfaces, Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre, Porto Alegre - RS, 90050-170.

Palavras-Chave: nanopartículas de prata, síntese verde, AgNP.

Introdução

Nanopartículas metálicas sintetizadas por métodos verdes são foco de diversos estudos por apresentarem as propriedades únicas da escala nanométrica utilizando rotas sintéticas ambientalmente eficientes. Porém, sua aplicabilidade ainda é limitada por um importante desafio: a instabilidade temporal. (1-2)

Diante disso, este trabalho objetivou sintetizar, caracterizar e avaliar a estabilidade de nanopartículas de prata (AgNP) utilizando agentes redutores (sacarose e maltose) e estabilizantes (gelatina) atóxicos.

Resultados e discussão

A rota sintética utilizada para a obtenção e caracterização de AgNPs está apresentada na Fig 1.

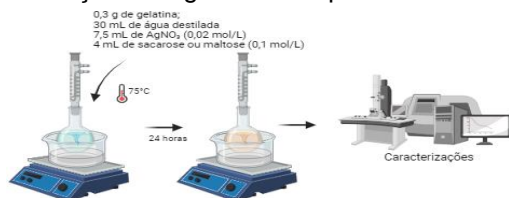


Figura 1. Síntese e caracterização das AgNPs.

A obtenção de AgNPs para ambos os agentes redutores (sacarose ou maltose) foi identificada pela presença da banda de ressonância de plasmon nos espectros na região do UV-Vis (Fig 2), típica de AgNPs esféricas. Após 5 meses, apenas as AgNP sintetizadas com sacarose (AgNP/S) permaneceram estáveis.

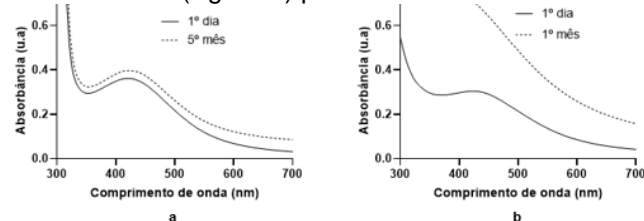


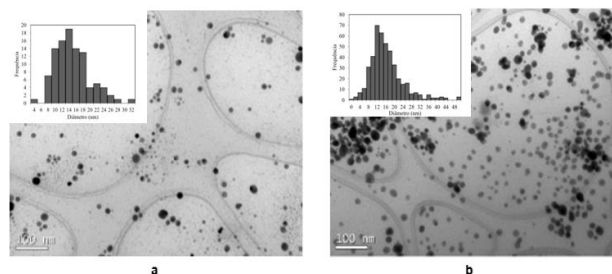
Figura 2. Espectros de UV-Vis de (a) AgNP/S e (b) AgNP/M.

Tal efeito pode estar relacionado com o potencial redutor da sacarose e maltose, onde a reação

mediada por sacarose ocorre mais lentamente, possibilitando a separação das etapas de nucleação e crescimento das NPs. Isso resulta em NPs homogêneas e com maior estabilidade.

A morfologia das AgNPs foi avaliada por microscopia eletrônica de transmissão (MET). Ambas apresentaram formato esférico (Fig 3) com tamanho médio de 15 nm. As AgNPs/S apresentaram menor polidispersividade, corroborando dados anteriores que relacionam com maior estabilidade termodinâmica.

Figura 3. Imagens de MET de (a) AgNP/S; e (b) AgNP/M. Figuras inseridas: histogramas de diâmetro das NPs.



Conclusões

AgNPs esféricas foram sintetizadas por uma rota verde, utilizando-se agentes redutores e estabilizantes atóxicos. O emprego de sacarose como agente redutor resultou em AgNPs mais homogêneas e estáveis por pelo menos 5 meses.

Agradecimentos



Referências e notas

- (1) Kumar, J. A et al.; *J Clean Prod* 2021, 15, 324.
- (2) Umai, D.; Vikranth, A.; Meenambiga, S. S.; *Mater Today Proc* 2021, 44, 3647.

Complexo de Cu(II) contendo ligante fenolato-imina com grupo pendente amina N-doador com potencial atividade antitumoral e antioxidante

Taise C. Nunes (IC)¹, Ianka J. Nunes (PG)¹, Renieidy Flávia C. Dias (PG)², Osvaldo de L. Casagrande Jr.(PQ)³, Jenifer Saffi (PQ)⁴, Adriana C. Pinheiro (PQ)^{1*},

¹Grupo de Catálise e Estudos Teóricos – Universidade Federal de Pelotas

²Programa de Pós-Graduação em Química – Universidade Federal de Uberlândia

³Laboratório de Catálise Molecular – Universidade Federal do Rio Grande do Sul

⁴Laboratório de Genética Toxicológica – Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre

Palavras-chave: bases de Schiff, complexos de cobre(II), atividade antitumoral

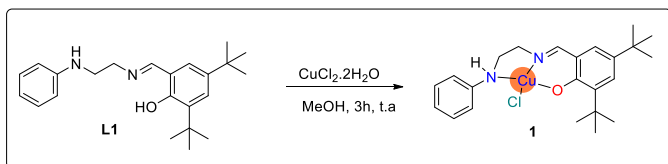
*acpinheiro@ufpel.edu.br

Introdução

Os tratamentos quimioterápicos desempenham um papel crucial no combate ao câncer. No entanto, esses fármacos podem apresentar uma série de desafios e efeitos colaterais significativos para os pacientes. Os complexos de cobre são uma opção atraente como metalofármacos no tratamento do câncer, com base no fato de que metais endógenos como o Cu, podem ser menos tóxicos para as células normais. Esses compostos podem ter um mecanismo de ação diferente dos medicamentos clássicos de platina (Pt) e, assim podem potencialmente evitar a quimiorresistência adquirida aos medicamentos atualmente disponíveis (1). Nosso grupo de pesquisa vem estudando o potencial anticâncer de novos complexos de Cu(II) contendo ligantes bases de Schiff. No presente trabalho, descrevemos a síntese e caracterização do complexo **1** contendo o ligante base de Schiff (**L1**). Esses compostos foram investigados quanto ao potencial antioxidante e antitumoral.

Resultados e discussão

O complexo **1** foi sintetizado pela reação equimolar de **L1** com CuCl₂·2H₂O em metanol à temperatura ambiente (Esquema 1).



Esquema 1. Rota geral de síntese do complexo de cobre **1**.

A análise de raios X de monocristal do complexo **1** revelou um complexo mononuclear e um complexo

dinuclear no estado sólido. A natureza monomérica do complexo **1** é mantida em solução. O composto foi caracterizado por diferentes técnicas analíticas. Estudos eletroquímicos e de estabilidade em solução aquosa foram realizados. O complexo **1** apresentou melhor atividade em comparação com o padrão positivo (ácido ascórbico) no ensaio DPPH (IC₅₀ = 6,3 μM para **1** e 17,0 μM para ácido ascórbico). Já na de eliminação do cátion radical sintético ABTS, ambos os compostos **L1** e **1** demonstraram atividade semelhante e comparável ao controle positivo (IC₅₀ 10,8 μM). Ambos compostos apresentaram alta atividade citotóxica (Tabela 1), antiproliferativa e dano ao DNA. Porém, o complexo **1** foi seletivo para câncer colorretal.

Tabela 1. Resultados de viabilidade celular (IC₅₀).

Composto	MRC-5	MCF-7	SW620
	IC ₅₀ (μM)		
L1	14,7 ± 1,1	30,5 ± 4.4	27,6 ± 1,2
1	53,9 ± 11,0	79,9 ± 7.8	33,9 ± 3,7

Conclusões

Um novo complexo de Cu(II) contendo um derivado de base de Schiff foi sintetizado e caracterizado. Esse composto apresentou potencial atividade antioxidante e citotóxica, sendo seletivo para câncer colorretal

Agradecimentos

PPGQ/UFPel, FAPERGS, CNPq, CAPES, FAPEMIG.

Referencias e notas

¹ Johnson, A.; Northcote-Smith, J.; Suntharalingam, K. Emerging Metallopharmaceuticals for the Treatment of Cancer. *Trends Chem.* **2021**, 3, 47–58.

Síntese e caracterização de complexos de cobre (II) contendo ligantes amino-pirazóis de interesse medicinal

Elvis F. Silveira Jr. (IC)¹, Tamara dos S. Machado (PG)¹, Renieidy Flávia C. Dias (PG)², Wilson Cunico Filho (PQ)³, Adriana Castro Pinheiro (PQ)^{1*}

¹Grupo de Catálise e Estudos Teóricos – Universidade Federal de Pelotas

²Programa de Pós-Graduação em Química – Universidade Federal de Uberlândia

³Laboratório de Química Aplicada a Bioativos – Universidade Federal de Pelotas

Palavras-chave: complexos de cobre(II), síntese, caracterização

*acpinheiro@ufpel.edu.br

Introdução

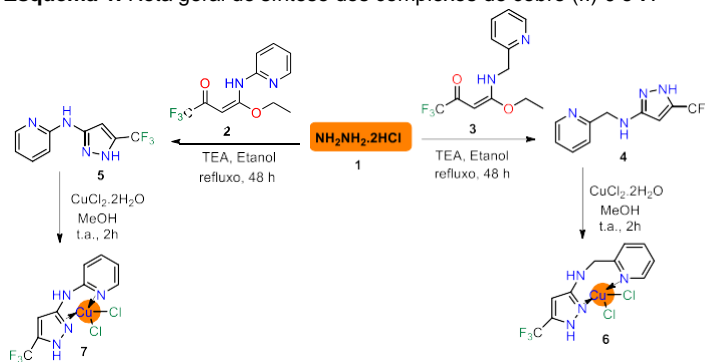
A química de coordenação é uma área importante no desenvolvimento de novos candidatos a fármacos com diversas aplicações no campo da biomedicina. A partir da escolha do metal de transição, há possibilidade de selecionar o grupo funcional orgânico, que irá melhor atender a finalidade que se quer dar ao composto de coordenação no âmbito farmacológico. Nos humanos, o cobre é um oligoelemento metálico indispensável no corpo e um cofator necessário para o organismo. Complexos de cobre com diversas classes de ligantes aplicados em células tumorais são descritos poder efetivamente induzir a morte das células tumorais [1]. Desta forma, pesquisadores da área de química inorgânica medicinal vem projetando o desenvolvimento de complexos de Cu (II) para investigar o potencial desses compostos como agentes antitumorais.

No presente trabalho, foram sintetizados e caracterizados dois novos complexos de cobre (II) com ligantes bidentados da classe amino-pirazóis. Estudos de citotoxicidade, genotoxicidade e atividade antiproliferativa estão em andamento em células humanas tumorais e normais.

Resultados e discussão

Os pré-ligantes foram sintetizados via ciclocondensação entre dicloridrato de hidrazina (1) e a β -enaminona (*E*)-4-etoxi-1,1,1-trifluoro-4-(2-aminopiridina)-but-3-en-2-ona (2) ou a β -enaminona (*E*)-4-etoxi-1,1,1-trifluoro-4-(2-piridinometanamina)-but-3-en-2-ona (3) levando aos compostos, 4 e 5. A reação dos pré-ligantes 4 e 5 com 1 equiv. de $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ em MeOH, por 2h promoveu a formação dos complexos 6 e 7 com 45% e 79%. A rota geral de síntese e dos pré-ligantes e seus respectivos complexos está apresentada no Esquema 1.

Esquema 1. Rota geral de síntese dos complexos de cobre (II) 6 e 7.



Os pré-ligantes foram caracterizados por RMN ¹H e ¹³C. Ligantes livres e complexos foram caracterizados por espectroscopia na região do IV, UV-vis e fluorescência. Otimização da geometria molecular por cálculos baseados na teoria do funcional de densidade (DFT) estão em andamento. Estudos por difração de raios X de monocristal e análise elementar estão em andamento.

Conclusões

Foram sintetizados dois novos complexos de Cu (II) contendo ligantes bidentados derivados da classe amino-pirazóis. As estruturas foram elucidadas com base nas análises de espectroscopia na região de IV e UV-vis. Avaliação da pureza por análise elementar e determinação estrutural já estão em andamento.

Agradecimentos

PPGQ/UFPel, FAPERGS, FAPEMIG, CNPq, CAPES.

Referências

¹ Ji, P.; Wang, P.; Chen, H.; Xu, Y.; Ge, J.; Tian, Z.; Yan, Z. Potential of Copper and Copper Compounds for Anticancer Applications. *Pharmaceuticals* **2023**, *16*, 234.

Modificação de sílica mesoporosa SBA-15, utilizando Ferro II e o uso de reagente Fenantrolina para quantificação

Wanderson da Silva Roriz *(PG), Gabriel Tavares Couto (IC), Célia Francisca Centeno da Rosa (PQ), Daniela Bianchini (PQ). wanderson.silvaroriz@gmail.com

Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Universidade Federal de Pelotas - UFPel, Pelotas -RS

Palavras Chave: Sílica, SBA-15, Adsorção, Ferro II, Inorgânica.

Introdução

A sílica do tipo SBA-15 é um material importante na ciência dos materiais devido às suas propriedades texturais. A SBA-15 pertence à família das sílicas mesoporosas, caracterizada por sua estrutura de poros altamente organizada, que consiste em uma rede tridimensional de poros cilíndricos (1). A SBA-15 é conhecida por sua alta área superficial, porosidade, estabilidade térmica e pela capacidade de ser modificada, sendo esta, uma característica fundamental que amplia a gama de aplicações e a torna valiosa em pesquisa e desenvolvimento de novos materiais. Portanto, este estudo visa estimar a concentração a partir da qual ocorre a saturação da superfície com íons Fe(II), para que posteriormente seja estudada a afinidade e seletividade do material por ânions contaminantes em águas residuais.

Resultados e discussão

Os ensaios para quantificação de Fe(II) impregnados na sílica foram adaptados a partir do trabalho publicado por SCHILT (3). Para a realização dos testes foram preparadas soluções com distintas concentrações de Fe(II), usando a 1,10-fenantrolina; como reagente de complexação. A formação do complexo confere cor à solução, permitindo a construção de uma curva de calibração. Assim, partindo-se de soluções com concentrações conhecidas, foram determinadas as concentrações de Fe(II) ainda presentes nas soluções após a impregnação da SBA-15 (100 mg) com o metal (Figura 1). O valor constante da absorbância após 3 mg/L indica a saturação da superfície da SBA-15 com íons Fe(II).

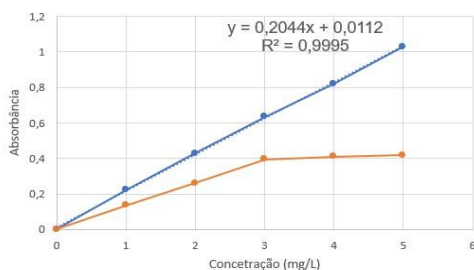


Figura 1. Azul: curva de calibração do Fe(II) em solução; laranja: curva que indica a saturação da superfície da SBA-15 com Fe(II).

A partir da construção das curvas na Figura 1, foi observada uma estabilização da concentração de Fe(II) na solução a partir de 3,0 mg/L, indicando a saturação da superfície da sílica. A partir desta concentração, a SBA-15 não comporta mais os íons Fe(II) em sua superfície.

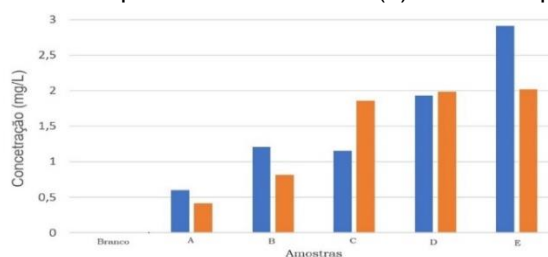


Figura 2. Azul: Concentração de Fe(II) na solução depois de aplicada a sílica; Laranja: esperado na superfície da sílica.

Sendo assim, podemos observar em termos de concentração o quanto de Fe(II) se manteve em solução, e uma estimativa do quanto ficou impregnado na superfície da SBA-15.

Conclusões

Considerando a metodologia testada para a quantificação de Ferro II, verificou-se que foi obtido um valor de R^2 bastante satisfatório, este valor obtido possibilitou estimar a impregnação de ferro na sílica, por diferença de ferro na solução antes e após ser aplicada a sílica.

Agradecimentos

Os autores agradecem aos professores e colegas do Laboratório LASIR, e aos professores e técnicos do CCQFA-UFPel, que sempre se mostraram dispostos a auxiliar. W.S.R. agradece a CAPES pela concessão da bolsa de mestrado.

Referências e notas

- ZHAO, D.; HUO, Q.; FENG, J.; CHMELKA, B. F.; STUCKY, G. D. Tri-, Tetra-, and Octablock Copolymer and Nonionic Surfactant Syntheses of Highly Ordered, Hydrothermally Stable, Mesoporous Silica Structures. *Journal American Chem. Soc.*, 1998.
- SCHILT, Alfred A. Analytical applications of 1,10-phen and related compounds: international series of monographs in analytical chemistry. *Elsevier*, 2013.

Síntese, caracterização e avaliação de citotoxicidade de um novo complexo de cobre contendo ligante tridentado fenolato-imina com átomos doadores N,N,O

Alecia Ferreira da Silva¹, Ianka Jacondino Nunes², Renieidy Flávia C. Dias³, Osvaldo de Lazaro Casagrande Jr.⁴, Jenifer Saffi², Adriana Castro Pinheiro^{1*}

¹Grupo de Catálise e Estudos Teóricos – Universidade Federal de Pelotas

²Laboratório de Genética Toxicológica – Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre

³Programa de Pós-Graduação em Química – Universidade Federal de Uberlândia

⁴Laboratório de catálise Molecular – Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Palavras-chave: bases de Schiff, complexos de cobre(II), atividade citotóxica

Introdução

Compostos contendo cobre, um metal bioessencial são de interesse na química inorgânica medicinal, apresentando atividades antioxidantes, antiinflamatórias antifúngicas e antitumoral [1]. Bases de Schiff (CH=N-) são estudadas por sua flexibilidade estrutural e aplicações farmacológicas. Nosso grupo de pesquisa vem trabalhando no desenvolvimento de complexos de Cu(II) contendo ligantes derivados de bases de Schiff e aplicações desses complexos, como candidatos a agentes antitumorais e antioxidantes. Nossos estudos iniciais são promissores [1] e nesse trabalho apresentamos a síntese e caracterização de um novo complexo de Cu(II) contendo um ligante tridentado da classe bases de Schiff com grupos farmacofóricos fenóxi e imina. Visando o desenvolvimento de novos candidatos a fármacos antitumorais, o novo complexo sintetizado [Cu(L1)]ClO₄ (**1**) contendo o ligante (E)-2,4-di-terc-butil-6-(((2-(fenilamino)etil)imino)metil)fenol (L1), foi avaliado quanto ao seu potencial de citotoxicidade em linhagens de células fibroblastos de pulmão humano (MRC-5), adenocarcinoma de mama (MCF-7) e câncer colorretal (SW620).

Resultados e discussão

A rota geral de síntese do complexo **1** é apresentada na Figura 1.

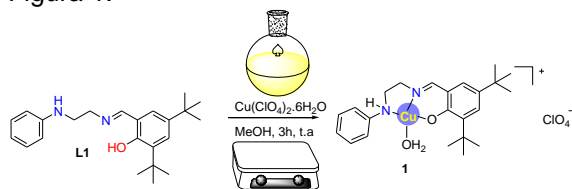


Figura 1. Esquema de síntese do complexo **1**.

O complexo **1** foi caracterizado por espectroscopia de IV, UV-vis e ESI-MS. A viabilidade celular do composto **1** foi avaliada por ensaio MTT contra a linhagem celular humana tumoral (câncer de mama, MCF-7) e normal (MRC-5). Na Tabela 1 são apresentados os valores de IC₅₀ de cada ensaio, ou seja, a concentração em que cada composto (**1** e L1) inibiu 50% da viabilidade celular.

Tabela 1. Resultados de viabilidade celular (IC₅₀) de **1**.

Composto	MRC-5	MCF-7	SW620
	IC ₅₀ (µM)		
L1*	14,7 ± 1,1	28,6 ± 1,7	16,4 ± 2,4
1	76,10 ± 0,9	51,01 ± 1,7	64,19 ± 1,8

Concentração do ensaio foi de 1 à 100 µM.

*Resultados já publicados¹

Conclusões

Um novo complexo de Cu(II) foi sintetizado e estudos de caracterização por diversas técnicas analíticas estão em andamento. A avaliação de citotoxicidade em linhagens celulares normais e humanas mostram que o pré-ligante L1 apresenta alto potencial de citotoxicidade comparado ao complexo **1**. Porém, **1** é seletivo para câncer de mama e colorretal.

Agradecimentos

PPGQ/UFPel, FAPERGS, CNPq, CAPES.

Referências

¹Pinheiro, A.C. et al. *Pharmaceutics* 2023, 15, 376. <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics15020376>

Síntese da Ni-MOF a partir do ácido glutâmico e carbonato básico de níquel.

Luana T. C. Silva (PG),^{1*} Rodrigo V. Rodrigues (IC),¹ Sílvia D. de Campos (PQ),¹ Ronan F. F. de Souza (PQ),¹ Élvio Antônio de Campos (PQ)¹

luanacasagrande18@gmail.com

¹Cento de Engenharias e Ciências Exatas, Unioeste – Campus Toledo – PR.;

Palavras Chave: Complexo, Estrutura metalo-orgânica, Estrutura cristalina, Ácido glutâmico.

Introdução

As estruturas metalo-orgânicas são compostos cristalinos e porosos que vêm chamando a atenção em estudos de novos materiais e rotas sintéticas, devido à sua síntese simples e de baixo custo. Esses compostos têm diversas aplicações potenciais, desde armazenamento de gases, catálise e até fins farmacêuticos, como entrega de medicamentos.

O ácido glutâmico (H₂Glu) é um aminoácido não essencial presente em muitos organismos vivos e possui um grupo ácido carboxílico na cadeia principal e também na cadeia lateral, permitindo usos estratégicos como ligante polidentado para sintetizar estruturas semelhantes a MOF. Várias estruturas contendo este ligante são conhecidas e podem ser classificadas como BioMOFs ou MBioFs, por exemplo, compostos de cobalto¹, cobre² e zinco³.

Resultados e discussão

Foi obtido um complexo [Ni(Hglutamato)₂] por meio do ácido glutâmico e do carbonato básico de níquel, com rendimento de 85%. Apresentou coloração verde e aspecto amorfo, não apresentando padrão de difração de raios X. Este complexo, foi caracterizado por análise elementar, espectroscopia infravermelha, UV-vis e análise termogravimétrica, uma vez que é difícil cristalizar de forma semelhante aos compostos de paládio com o mesmo ligante⁴ ou ao composto de níquel com aspartato⁵.

Também foi sintetizado uma Ni-MOF [Ni(glutamato)(H₂O)₂]_n, com coloração verde intensa e brilho, a partir do complexo citado anteriormente por meio hidrotérmico, com rendimento de 43%. Esta MOF, foi caracterizada por DRX, IR e TGA. Apresentou padrão de difração de raios X idêntico ao observado para compostos similares de cobalto, cobre e zinco e sua estrutura cristalina foi resolvida por difração de raios X monocristalino que confirma a célula unitária ortorrômbica pertencente ao grupo espacial P2₁2₁2₁ (figura 1).

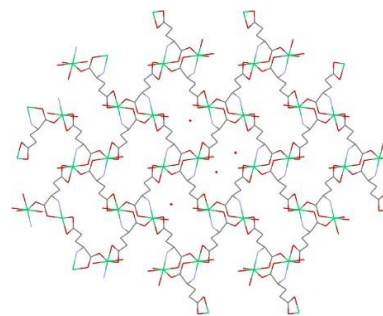


Figura 1. Estrutura supramolecular vista do plano cristalográfico “ab”.

Conclusões

A reação entre o carbonato básico de níquel e o ácido glutâmico conduziu à formação de um complexo molecular amorfo de fórmula [Ni(Hglutamato)₂], que quando submetido a reação hidrotérmica formou um sólido cristalino inédito com fórmula [Ni(glutamato)(H₂O)₂]_n.

Agradecimentos

UNIOESTE, PPGQUI, CAPES.

Referencias e notas

- (1) Zhang, Y.; Saha, M. K.; Bernal, I. *Cryst Eng Comm.* **2003**, *5*, 34-37.
- (2) Gramaccioli, C. M.; Marsh, R. E. *Acta Cryst.* **1966**, *21*, 594-600.
- (3) CherianáKathalikkattil, A.; JuneáCho, S. *Chem. Commun.* **2016**, *52*, 280-283.
- (4) Spacu, P.; Scherzer, I. Z. *Anorg. Allg. Chem.* **1962**, *319*, 101-106.
- (5) Aiyelabola, T. O. et al. *J. Chem.* **2016**, *2016*, 1-8.



SBQ SUL

29º Encontro de Química da Região Sul

Um olhar para o futuro

QUÍMICA ORGÂNICA

Sessões Coordenadas

19 de outubro (Quinta-feira) - Sala 602

	Palestrante: Profa. Dra. Fernanda Andréia Rosa (UEM) Heterociclos Nitrogenados: Síntese e aplicação farmacológica de azóis, azinas e azepinos
ORG 001	Síntese e Análise do Movimento Rotacional de Novos Protótipos de Máquinas Moleculares - [2]Rotaxanos Baseados no Macrociclo de Tetralactama e Estações Fumaramidas. <i>Fellipe F. S. Farias (PG); Gustavo H. Weimer (PG); Suzan K. Kunz (IC); Paulo R. S. Salbego (PQ); Tainára Orlando (PQ); e Marcos A. P. Martins (PQ) - UFSM</i>
ORG 011	Síntese de um Novo Híbrido Imidazol-1,4-dihidropiridina e Ancoragem Molecular com a Kinase Akt1 na Busca de Potenciais Antitumorais. <i>Claudiana Dotti (IC); Isadora B. Pacheco (PG); Rodrigo C. Zefferino (PQ); Rozangela C. Pedrosa (PQ); Helena D. de Salles (PQ); Diana Lousa (PQ); Claudio M. Soares (PQ); e Ricardo F. Affeldt (PQ) - UFSC</i>
ORG 015	FeCl₃/TBAB como um Sistema Fotocatalítico para a Síntese Benzocalcogenazóis Promovida por Luz Visível. <i>Viviane T. Mena (IC); Luiz H. Dapper (PG); Mateus W. Rambo (IC); Filipe Penteadó (PQ); e Eder J. Lenardão (PQ) - UFPEL</i>
ORG 042	Estudo Metodológico da Redução de Sais de Bunte Visando a Obtenção de Sulfetos Simétricos e Dissimétricos. <i>Vitor Emanuel Simette Zerger (PG); e Rogério Aparecido Gariani (PQ) - UDESC</i>
ORG 078	Síntese de Novos Derivados Pirazínicos Análogos ao Vorinostat. <i>Guilherme Augusto Justen (PG); Marcelo G. M. D'Oca (PQ); Eduardo Q. da Luz (PG); e Daniel S. Rampon (PQ) - UFPR</i>

20 de outubro (Sexta-feira) - Sala 602

	Palestrante: Prof. Dr. Tiago Elias A. Frizon (UFSC) Materiais Funcionais, Compostos Bioativos e Sustentabilidade, os desafios para a consolidação de pesquisa aplicada em campus universitário
ORG 034	Síntese, Caracterização e Avaliação das Propriedades Térmicas de Novos Líquidos Mono e Dianiônicos Derivados de Ânions Carboxilatos. <i>Julia Eduarda Spode (IC); José Lúcio Bauer Vieira (IC); Jean Carlos Bauer Vieira (PG); Genilson dos Santos Pereira (PG); Clarissa P. Frizzo (PQ); e Caroline R. Bender (PQ) - UFSM</i>
ORG 043	Síntese de 5-Hidroximetilfurfural a partir de Frutose Catalisada por Ácido Sulfâmico Utilizando Radiação de Microondas. <i>Vinícius Bertoncello Molon (PG); e Thiago Barcellos (PQ) - UCS</i>
ORG 052	Síntese de Cristais Líquidos Curvados Derivados da Dibenzalacetona. <i>Manoela Santos Corrêa (IC); Monike da Silva Kutz (PG); Matheus Julian Cruz Gomes (PG); Gustavo Sérgio dos Santos (PG); e Eduard Westphal (PQ) - UFSC</i>
ORG 068	Efeito da Concentração do Extrato Enzimático na Hidrólise da Celulose. <i>Estêvan Casarin Pereira (IC); Daniel da Rosa Couto (IC); Victor Duarte Pedroso (IC); Jander Luis Fernandes Monks (PQ); e Ricardo Pereça Toralles (PQ) - IFSul</i>
ORG 071	Extração de Matéria Orgânica de Rochas Carbonáticas: Avaliação de Técnicas Baseadas em Solventes. <i>Jéssica T. de Lima (PG); Anelize M. B. Rumbelsberger (PQ); Leonardo F. Cury (PQ); e Caroline R. M. D'Oca (PQ) - UFPR</i>

Sessão de Pôsteres

QO 002	Desenvolvimento baterias recarregáveis de alto desempenho baseadas em NDIs. Clara Holthausen (IC), Cassiano Damiani Tomasi (IC), Luiz Fernando Belchior (PG), Tiago Elias Allievi Frizon (PQ) - UFSC
QO 003	Desenvolvimento de tintas com atividade antimicrobiana utilizando diferentes redutores. Maria Clara Lima Oliveira (IC), Natália Preve (IC), Luiz Belchior (PQ), Suelen da Silva (PG), Shirley Kuhnen (PQ), Tiago Frizon (PQ) - UFSC
QO 004	Atividade antimicrobina e antibiofilme do extrato da flor de <i>Leonotis nepetifolia</i>. Débora Fioravante da Silveira (IC), Luciana de Oliveira Adolpho (PG), Luísa Helena Alves Paz (PG), Prof. Dr. Ademir Farias Morel (PQ), Ionara Irion Dalcol (PQ) - UFSM
QO 005	Ressonância magnética nuclear de ^1H para determinação da quantidade de confômeros de [2]rotaxano em solução. Vitor de Arruda Kessler (IC), Gustavo Henrique Weimer (PG), Fellipe Freire Santos Farias (PG), Marcos Antonio Pinto Martins (PQ) - UFSM
QO 006	Síntese de novos selenoesteroides e análise da interação com o DNA. Natã Marcon Carniel (IC), Angélica Medeiros de Costa (PG), Tiago Elias Allievi Frizon (PQ) - UFSC
QO 007	Controle da Hidratação de UHPC Por Ressonância Magnética Nuclear. Laura Santos (IC), Rosangel Rojas (PQ), José Rafael Yopez (PQ), Rosilene Clementin (PQ), Diego Cabrera (PQ), Vania Rodrigues de Lima (PQ) - FURG
QO 008	Síntese de inibidores da esfingomielinase ácida seleno e tio substituídos. Pedro José Tronco Pauletto (IC) e João Batista Teixeira da Rocha (PQ) - UFSM
QO 009	Atributos físico-químicos de méis produzidos nos Campos de Cima da Serra do Estado do Rio Grande do Sul. Bruna Bento Drawanz (PQ), Luana Hofmam Cavalheiro (IC), Jefferson Prigolli (IC), Fernanda Magalhães Stalliviere (PQ) - UERGS
QO 010	Síntese e agregação de líquidos iônicos mono e dicatiônicos derivados de aminoácidos (LIAAs). Milena De Nardin (IC), Amanda Cargnin de Moraes (IC), Vinicius Dalcin Lacorte (IC), Thaíssa Silva Beck (PG), Leticia Zibetti (PG), Clarissa Piccinin Frizzo (PQ) - UFSM
QO 012	Proposta de Mecanismo de Nucleação de Álcoois Benzílicos Halogenados a partir de dados Supramoleculares Energéticos e Topológicos Teóricos. Patrick Teixeira Campos (PQ), Pedro Henrique Cunha Do Couto (IC), Álex Canez Lemos Souza (IC) - IFSUL
QO 013	Síntese de 3-(4-alcoxifenetil)-5-(trihalometil)isoxazóis derivados da raspberry ketone e estudo do potencial antioxidante. Taís B. Goulart (FM), Adriana M. Neves (PQ), Nycolas S. Gonçalves (IC), Alex F. C. Flores (PQ) - FURG
QO 014	Planejamento, síntese e avaliação do potencial antitumoral e antioxidante dos compostos aciltioureias. Renieidy F. C. Dias (PG), Ianka J. Nunes (PG), Taise C. Nunes (IC), Malick F. Dabo (IC), Mariana A. Paim (IC), Ana M. P. Stevens (PQ), Raúl R. Cairo (PQ), Raúl O. M. Castell (PQ), Jenifer Saffi (PQ), Adriana Castro Pinheiro (PQ) – UFU
QO 015	$\text{FeCl}_3/\text{TBAB}$ como um Sistema Fotocatalítico para a Síntese Benzocalcogenazóis Promovida por Luz Visível. Viviane T. Mena (IC); Luiz H. Dapper (PG); Mateus W. Rambo (IC); Filipe Penteado (PQ); e Eder J. Lenardão (PQ) - UFPEL
QO 016	Luz visível e Trisseleneto de Dinitrila (TSD): Novos horizontes na síntese de selenocianatos orgânicos. Sabrina Souza Ferreira (IC), João M. Anghinoni (PG), Filipe Penteado (PQ), e Eder J. Lenardão (PQ) - UFPEL

QO 017	Similaridade (Supra)Molecular de Diamidas Substituídas e dos Respectivos [2]Rotaxanos: Conseqüências no Processo De Cristalização. Amanda Moura Kieling (IC) Fellipe F. Santos Farias (PG); Gustavo Henrique Weimer (PG); Suzan K. Kunz (IC); Marcos Antonio P. Martins (PQ) - UFSM
QO 018	Efeito provocado pelo solvente no perfil de deslocamento químico do núcleo de ⁷⁷Se nas análises de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de diferentes disselenetos de difenila. Lucas Emanuel Beluzzo Iarocz (IC), Ricardo Hellwig Bartz (PG), Paola dos Santos Hellwig (PG), Gelson Perin (PQ), Andrea Madabeni (PG), Laura Orian (PQ) e Márcio S. da Silva (PQ) - UFPEL
QO 019	Material Polimérico Nanoestruturado para liberação pH-responsiva da Curcumina. Ana Carolina Domingues Fidalgo (PG) e Adriana Passarella Gerola (PQ) - UFSC
QO 020	Extração, caracterização química e atividade antifúngica do óleo essencial de folhas da espécie <i>Acca sellowiana</i> (O. Berg) Burret. Renata Salamoni (PG), Iêda Maria Begnini (PQ), Ricardo Andrade Rebelo (PQ) - FURB
QO 021	Síntese e Caracterização de Fluoróforos Heteroarilpropanohidrazonas Derivadas do Ácido Levulínico. Adriana M. Neves (PQ), Juliana L. Malavolta (PQ), Guilherme C. Asoo (IC), José Eduardo A. Toledo (IC), Taís B. Goulart (FM), Fernanda Ludwig (PG), Daniele Müller (PG), Alex F. C. Flores (PQ) - FURG
QO 022	Síntese fotocatalítica de 3-selanilindóis sob irradiação de luz visível utilizando ácido arilselenínico como agente selenilantes. Gabriela T. de Quadros (IC), Carolina A. de Oliveira (IC), Savana P. de Medeiros (IC), Laura Abenante (PG), Eder J. Lenardão (PQ) - UFPEL
QO 023	Extrato bruto das cascas das raízes de <i>Maytenus ilicifolia</i>: Comparação de técnicas de extração e análise fitoquímica preliminar. Luísa Helena Alves Paz (PG), Débora Fioravante da Silveira (IC), Ionara Irion Dalcol (PQ), Ademir Farias Morel (PQ) - UFSM
QO 024	INFLUÊNCIA DE COMPOSTOS ORGANOSELENIO NA MOBILIDADE DE MEMBRANAS LIPÍDICAS. Eduardo Borges Velho da Silva (IC), Desirée dos Santos Magalhães Costa (PG), Tiago E. A. Frizon (PQ), Vânia Rodrigues de Lima (PQ) - FURG
QO 025	Síntese de 9,10-bis(organosselanil)fenantrenos promovida por Oxone®. Jonatan dos Santos Guedes (IC), Paola dos Santos Hellwig (PG), Helen Afonso Goulart (PG), Emily G. Jorge (IC), Angelita M. Barcellos (PQ), Gelson Perin (PQ) - UFPEL
QO 026	Tingimento de tecidos com pigmento fluorescente sintetizado com diferentes catalisadores e sua caracterização. Nicolas M. M. Barreto (IC), Gustavo H. Morelli (IC), Vanessa A. Matias (TC), Albertina X. da R. Correia (PQ) - UNIVALI
QO 027	Produção de biodiesel a partir do óleo de babaçu: comparação da obtenção por catálise ácida, básica e enzimática. Isabella Tanaka Lopes da Silva (IC), Sofia Maniezzi Macre (IC), Luciano Fernandes (PQ) - UFTPR
QO 028	Preparo de emulsões do Fluconazol utilizando Líquidos Iônicos Ativos na Superfície (SAILs) como emulsificantes. Vinícius D. Lacorte (IC), Letícia Zibetti (PG), Milena de Nardin (IC), Clarissa P. Frizzo (PQ) - UFSM
QO 029	Investigação da estabilidade térmica e em solução da curcumina natural. Rayane Martins Braga (IC); Danielle T. Bueno (PG); Amanda F. Leitzke (PG); Juliana da S. Porciúncula (IC); Caroline I. Silveira (IC); Tamara Mendes L. S. Trindade (PG); Claudio Martin P. de Pereira (PQ) - UFPEL
QO 030	FeCl₃/TBAB como sistema fotocatalítico na síntese de quinazolinonas mediada por luz azul. Mateus Wagner Rambo (IC), Viviane Tessmer Mena (IC), Luiz Henrique Dapper (PG), Eder João Lenardão (PQ), Ricardo Frederico Schumacher (PQ), Filipe Penteado (PQ) - UFSM
QO 031	Oxalato Amoniacal de Nióbio (ANO) como um catalisador eficiente na reação de Paal-Knorr para síntese de pirróis N-substituídos. Luiz H. Dapper (PG), Kethelyn M. da Rosa (PG), Viviane T. Mena (IC), Filipe Penteado (PQ) e Eder J. Lenardão (PQ) – UFPEL

QO 032	Síntese, caracterização e estudo da agregação de líquido iônico imidazólico ligado covalentemente a compostos aromáticos. Letícia Zibetti (PG), Victor dos Santos Pereira (PG), Thaíssa Silva Beck (PG), Bruno Stona Cassol dos Santos (IC), Caroline Raquel Bender (PQ), Clarissa Piccinin Frizzo (PQ) - UFSM
QO 033	Síntese de 3-sulfeniltiocromonas promovida por luz visível. Ricardo H. Bartz (PG), Krigor B. Silva (PG), Rafaela R. S. A. Santos (IC), Thiago J. Peglow (PG), Eder J. Lenardão (PQ), Bernardo A. Iglesias (PQ), Filipe Penteado (PQ), Raquel G. Jacob (PQ), Gelson Perin (PQ) - UFPEL
QO 035	Síntese de organocalcogeniltiocromonas promovida por Oxone®. Paola dos Santos Hellwig (PG), Angelita M. Barcellos (PQ), Roberta Cargnelutti (PQ), Thiago Barcellos (PQ), Gelson Perin (PQ) - UFPEL
QO 036	Síntese de 3-Organosselaniltiocromonas e Cromonas promovida por Oxone®. Krigor B. Silva (PG), Ricardo H. Bartz (PG), Thiago J. Peglow (PG), Angelita M. Barcellos (PQ), Raquel G. Jacob (PQ), Eder J. Lenardão (PQ), Gelson Perin (PQ) – UFPEL
QO 037	Análise das Propriedades Térmicas de Líquidos Iônicos Derivados dos Cátions Imidazólico e Colina com Contraíons Carboxilatos. Heitor M. Mendes (IC), Jean C. B. Vieira (PG), Thaíssa Beck (PG), Amanda Cargnin (PG), Guilherme Moleta (IC), Clarissa P. Fizzo (PQ), Caroline R. Bender (PQ) - UFSM
QO 038	Síntese one-pot de bromopillar[5]areno: eficiente alternativa à obtenção de macrocilos. Yasmin Petter da Veiga (IC), Maria Eduarda Sedrez Costa (IC), Ricardo Ferreira Affeldt (PQ) - UFSC
QO 039	Síntese e caracterização de líquidos iônicos derivados de 2-fenilbenzimidazol. William G. Volpato (PG), Clarissa P. Frizzo (PQ) - UFSM
QO 040	Caracterização espectroscópica de um sistema lipossomal contendo xilana. Desirée Magalhães dos Santos Costa (PQ), Alexandre Luiz Parize (PQ), Gabriel Jorge Sagrera Darelli (PQ), Vânia Rodrigues de Lima (PQ) - FURG
QO 041	A Influência da Estação na Energia de Estabilização Intercomponente de [2]Rotaxanos no Estado Sólido Cristalino. Suzan K. Kunz (IC), Fellipe F. S. Farias (PG), Gustavo H. Weimer (PG), Paulo R. S. Salbego (PQ), Tainára Orlando (PQ), Marcos A. P. Martins (PQ) - UFSM
QO 044	Síntese de 1,3-tiazolidin-4-ona derivada do 3,5-di-terc-butil-4-hidroxibenzaldeído e da 4-amino-antipirina com potencial para captura de radicais livres e analgesia. Melinda G. Victor (PG), Mariana M. M. Coelho (IC), Wilson Cunico (PQ) - UFPEL
QO 045	Extração da bixina da semente do urucum e aplicação na papiloscopia. Juliana da Silva Porciuncula (IC); Danielle Tapia Bueno (PG); Rayane Martins Braga (IC); Amanda Fonseca Leitzke (PG); Gabrielly Quartieri Sejanos (IC); Samuel Alves Pereira (IC); Claudio Martin Pereira de Pereira (PQ) - UFPEL
QO 046	FeCl₃/TBAB como sistema fotocatalítico na oxidação de tióis a dissulfetos, mediada por luz azul. João Batista Xavier Moraes (IC), Mateus Wagner Rambo (IC), Ricardo Frederico Schumacher (PQ), Filipe Penteado (PQ) - UFSM
QO 047	Selenação de 2-fenilimidazo[1,2-a]piridina promovida por luz visível utilizando ácido benzenosselenínico como agente selenilante. Caroline S. Gomes (PG), Carolina A. de Oliveira (IC), João M. Anghinoni (PG), Sabrina S. Ferreira (PG), Filipe Penteado (PQ) e Eder J. Lenardão (PQ) - UFPEL
QO 048	Influência da luz na produção de fenólicos em kombucha de erva-mate (Ilex paraguariensis). Suelen Santos da Silva (PG), Agenor Hentz Da Silva Junior (PQ), Patrícia Poletto (PQ), Tiago Elias A. Frizon (PQ), Roberta Bussamara Rodrigues (PQ) - UFRGS

QO 049	Preparação, Caracterização e Aplicação em Reação de Acoplamento Suzuki-Miyaura de um Novo Catalisador de Paládio Estabilizado por Polihexametileno Biguanida (PHMB). Marcella Moura (IC), Mateus Keller (PG) e Bruno Silveira de Souza (PQ) - UFSC
QO 050	O Papel das Interações Estabilizadoras e Desestabilizadoras na Formação da Rede Cristalina de Sais de Amônio. Gustavo H. Weimer (PG), Tainára Orlando (PQ), Paulo R. S. Salbego (PQ), Marcos A. P. Martins (PQ) - UFSM
QO 051	Síntese de análogos da Tacrina contendo selênio. Ariana Silveira Lima (PG), Manoela do Sacramento (PG), Gabriel Pereira da Costa (PG), Diego Alves (PQ) - UFPEL
QO 053	Avaliação da atividade antifúngica do eugenol covalentemente ligado ao Líquido Iônico brometo de 4-bromobutil(3-metilimidazol-1-ium) após síntese e caracterização. Bruno Stona Cassol dos Santos (IC), Victor dos Santos Pereira (PG), Thaíssa Silva Beck (PG), Letícia Zibetti (PG), Amanda Cargnin de Moraes (IC), Caroline Raquel Bender (PQ), Clarissa P. Frizzo (PQ) - UFSM
QO 054	Síntese regioseletiva de 2-azida-4-aryl-6-(trifluorometil)pirimidina utilizando meio reacional básico. Fernanda Piecha Ludwig (PG), Morilo A. Delevati (PG), Guilherme C. Asoo (IC), José Eduardo A. Toledo (IC), Adriana Machado das Neves (PQ), Alex Fabiani Claro Flores (PQ) - FURG
QO 055	Síntese de derivados da fluoresceína contendo selênio utilizando ácido benzenosselenínico. Kethelyn M. Rosa (PG), Nicole M. Washio (IC), Eder J. Lenardão (PQ) - UFPEL
QO 056	Controle da Hidratação de UHPC Por Ressonância Magnética Nuclear. Laura Santos (IC), Rosangel Rojas (PQ), José Rafael Yopez (PQ), Rosilene Clementin (PQ), Diego Cabrera (PQ), Vania R. Lima (PQ) - FURG
QO 057	Processo hidrotérmico de obtenção de açúcares fermentescíveis a partir da casca de arroz visando a produção de bioetanol. Daniel da Rosa Couto (IC), Estêvan Casarin Pereira (IC), Pâmela Moura Costa (IC), Claudio Rafael Kuhn (PQ), Ricardo Peraça Toralles (PQ) - IFSUL
QO 058	Cicloadição de Arilazidas com α-2-Piridinil-acetofenonas Catalisada por DBU. Livia Drawanz Jeske (IC), Allya Larroza (PG), Diego Alves (PQ) - UFPEL
QO 059	Análise da composição química da biomassa larval de mosca doméstica (<i>Musca domestica</i>). Tamara M. L. S. Trindade (PG), Carem Perleberg (IC), Carina M. Lima (IC), Gabrielly Q. Sejanos (IC), Juliana P. da Silva (IC), Cristina J. Alves (PQ), Claudio Martin P. de Pereira (PQ) - UFPEL
QO 060	Síntese em larga escala de curcumina via ultrassom. Samuel Alves Pereira (IC), Carina Machado Lima (IC), Victoria Borges Vaz de Leon (IC), Caroline Ieque Silveira (IC), Taís Poletti (PG), Claudio Martin Pereira de Pereira (PQ), Bruno Nunes da Rosa (PQ) - UFPEL
QO 061	Composição de Ácidos Graxos do óleo de mosca doméstica (<i>Musca Domestica</i>) determinado por CG-MS. Gabrielly Quartieri Sejanos (IC), Juliana Porciuncula da Silva (IC), Tamara Mendes Leite Silva Trindade (PG), Rayane Braga Martin (IC), Carem Perleberg (IC), Cristina Jansen Alves (PQ), Claudio Martin Pereira de Pereira (PQ) - UFPEL
QO 062	Óleo de arroz como atrativo no manejo de insetos-praga de armazenamento. Andrey Martinez Rebelo; Marcelo Mendes Haro; Lizandra Maria Zimmermann - FURB
QO 063	Atividade Antioxidante in vitro do Óleo Essencial das Folhas da <i>Tagetes Minuta</i> Linn. Livia C. L. Valente (IC), Raquel G. Jacob (PQ), Jenifer Fetter (PG), Lucielli Savegnago (PQ) e Daniela Hartwig (PQ) - UFPEL
QO 064	Síntese de curcuminas derivadas de ciclocetonas via ultrassom. Carina Machado Lima (IC), Caroline Ieque Silveira (IC), Rayane Braga Martins (IC), Samuel Alves Pereira (IC), Victoria Borges Vaz de Leon (IC), Bruno Nunes da Rosa (PQ), Claudio Pereira de Pereira (PQ) - UFPEL
QO 065	Isomerização de 1,4-Dialquinóis em Meio Básico para a Síntese de Pent-1-en-4-in-3-onas. Carolina A. de Oliveira (IC), Caroline S. Gomes (PG), Gabriele A. Aldrighi (IC), Estefani C. Pereira (IC), Juliano A. Roehrs (PQ), e Eder J. Lenardão (PQ) - UFPEL

QO 066	<i>Síntese de benzo[b]calcogenofenos selenados promovida por ácido tricloroisocianúrico.</i> Gustavo Bierhals Blödorn (PG), Márcio S. Silva (PQ) , Diego Alves (PQ) - UFPEL
QO 067	<i>Caracterização do óleo essencial de Curcuma longa LINN. obtido dos rizomas da planta comercializados em Pelotas.</i> Vitória Lopes Rodrigues (IC), Victória de Castro Armani (IC), Nicole Cristina M. Rocha (PG), Daniela Hartwig de Oliveira (PQ), Raquel Guimarães Jacob (PQ) - UFPEL
QO 069	<i>Síntese e avaliação da atividade antiespasmódica de derivados ftalimídicos.</i> Laura V. B. du V. França (IC), Daniele Regina Sonza (PG), Theodoro Marcel Wagner (PQ), Rogério Corrêa (PQ), Rita de Cássia Vilhena da Silva (PQ), Anelize Dada (PG), Mariana Zanovello (PG), Thaise Boeing (PQ), Priscila de Souza (PQ) - UNIVALI
QO 070	<i>Metodologia livre de solventes e metais para a calcogenação de 2H-indazóis usando I₂/DMSO como sistema catalítico.</i> Nicole Cristina Martins Rocha (PG), Daniela Hartwig de Oliveira (PQ), Raquel Guimarães Jacob (PQ)- UFPEL
QO 072	<i>Síntese dos 3-(Benzo[C][1,2,5]Calcogenodiazol-5-il)-5-(Ariletinil)-1,2,4-Oxadiazóis Derivados de Arilamidoximas e dos Ácidos 3-Arilpropiólicos.</i> Felipe da S. Pulgati (IC), Paola C. Pereira (PG); João C. P. Mayer (PG); Oscar E. D. Rodrigues (CO); Luciano Dornelles (O) - UFSM
QO 073	<i>Síntese de di-hidropirimidinas em reatores supramoleculares.</i> Camila Silva de Souza (IC), Fernanda Caroline Sousa, (IC) Simone Schneider Amaral (PQ) - UFCSPA
QO 074	<i>Espectroscopia de RMN de ¹H aplicada na Investigação de Equilíbrio de Interconversão de Confôrmeros de uma Molécula de [2]Rotaxano.</i> Ramon R. Prates (IC); Fellipe F. S. de Farias (PG); Gustavo Henrique Weimer (PG); Suzan K. Kunz (IC); Marcos Antônio M. Pinto (PQ) – UFCSPA
QO 075	<i>Rearranjo de Meyer-Schuster na Síntese de (E)-1,5-difenilpent-2-en-4-in-1-ona.</i> Caroline S. Gomes (PG), Iago Borges Pedra (IC), Carolina A. de Oliveira (IC), Juliana Pizzolato dos Santos (IC), Manoela Sacramento (PG), Patrick T. Campos (PQ), Diego Alves (PQ), Eder J. Lenardão (PQ), Juliano A. Roehrs (PQ) - UFPEL
QO 076	<i>Extratos aquosos de resíduos agroindustriais: Uma metodologia alternativa para a síntese de selenetos vinílicos.</i> Lucas M. C. Böhs (PG), Andrielli Leitemberger (FM), Natália E. B. Kuntz (PG), Benhur Godoi (PQ), Marcelo Godoi (PQ) - FURG
QO 077	<i>Síntese de 1,2,3-triazóis usando quitosana como organocatalisador.</i> Sabrina Acosta (IC), Gustavo B. Blödorn (PG), Henrique P. Mota (PG), André R. Fajardo (PQ), Diego Alves (PQ) - UFPEL
QO 079	<i>Síntese de 1,3-tiazolidin-4-onas utilizando como precursor a 4-(2-aminoetil)benzenossulfonamida.</i> Taís Pereira Ferreira (PG), Euler Viegas Limas (IC), Claudio dos Santos Nascimento (IC), Wilson Cunico (PQ) - UFPEL

Síntese e Análise do Movimento Rotacional de Novos Protótipos de Máquinas Moleculares – [2]Rotaxanos Baseados no Macroциclo de Tetralactama e Estações Fumaramidas

Fellipe F. S. Farias¹ (PG), Gustavo H. Weimer¹ (PG), Suzan K. Kunz¹ (IC), Paulo R. S. Salbego² (PQ), Tainára Orlando³ (PQ), Marcos A. P. Martins^{1,*} (PQ)

*E-mail: marcos.nuquimhe@gmail.com

¹Núcleo de Química de Heterociclos (NUQUIMHE), Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), 97105-230 Santa Maria, RS, Brasil. ²Núcleo de Química de Heterociclos (NUQUIMHE), Departamento de Engenharia e Tecnologia Ambiental (DETA), Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), 98400-000 Campus de Frederico Westphalen, RS, Brasil. ³Departamento Acadêmico de Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), 85884-000 Campus de Medianeira, PR, Brasil.

Palavras Chave: Rotaxanos, Movimento Rotacional, Interações Intercomponente, Máquinas Moleculares.

Introdução

Os rotaxanos são os modelos mais empregados para construção de máquinas moleculares devido as suas características intrínsecas. O amplo interesse reside na possibilidade de exercer movimentos controlados e reversíveis em nível molecular. Estes movimentos, por sua vez, estão diretamente correlacionados com as interações presentes nas moléculas de rotaxanos. Neste sentido, o macroциclo de tetralactama é amplamente empregado na síntese de rotaxanos, diversos eixos moleculares podem ser utilizados com este macroциclo. Parte fundamental do eixo é a estação, ela atua na formação, estabilização molecular e na magnitude dos movimentos. Inspirados nisto, buscamos explorar como a estação pode influenciar no movimento de rotação em solução. Portanto, foi sintetizado 4 novos modelos de [2]rotaxanos contendo a estação fumaramida. Através de experimentos de Ressonância Magnética Nuclear com técnicas de Variação de Temperatura (VT-RMN), foi possível calcular a magnitude energética necessária inerente do movimento de rotação. Ademais, os valores obtidos foram comparados com valores reportados na Literatura para moléculas análogas contendo outra estação diamida, succinamida.

Resultados e discussão

Os novos modelos de [2]rotaxanos com estações fumaramida estão representados na Figura 1, juntamente com seus pares succinamida. Eles foram sintetizados através de uma reação multicomponente e da metodologia de *clipping*. O valor da barreira rotacional foi obtido através da coalescência de sinais característicos. Nos experimentos de VT-RMN realizados, foram observados a mudança de deslocamento químico dos hidrogênios metilênicos do macroциclo. Quando obtida a temperatura de coalescência, utilizando a Equação de Eyring, foi possível calcular a energia de ativação do movimento de rotação (Figura 2). Os valores obtidos foram sumarizados na Tabela 1.

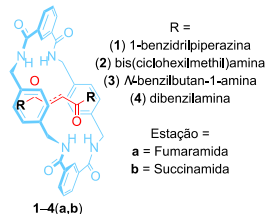


Figura 1. Rotaxanos usados neste trabalho.

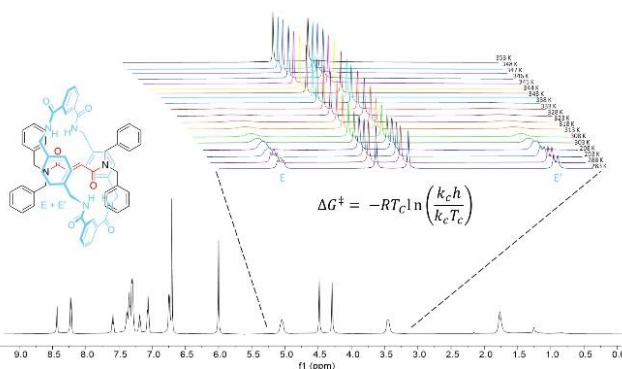


Figura 2. VT-RMN do composto **4a** expansão entre 5.4 – 3.2 ppm (600 MHz, CD₂Cl₄) e Equação de Eyring.

Tabela 1. Valor energético da barreira de rotação dos [2]rotaxanos, valores em kcal mol⁻¹.

Composto	a	b ^a
1	13,28	11,69
2	>15,93	14,71
3 ^b	15,59	13,08
4	14,99	12,49

^aValores obtidos na Literatura. ^bIsômero (E,Z).

Conclusões

Uma pequena mudança, como uma ligação dupla, modifica significativamente a barreira de rotação de um rotaxano. Esses dados são valiosos para modularmos o movimento de rotação em solução, utilizando as interações intercomponente como um lubrificante de uma máquina molecular.

Agradecimentos

FAPERGS, CNPq e Capes.

Referências e notas

- (1) *J. Mol. Liq.* **2023**, 385, 12229. (2) *Quim. Nov.* **2021**, 41, 76.

Desenvolvimento baterias recarregáveis de alto desempenho baseadas em NDIs

Clara Holthausen(IC)*, Cassiano Damiani Tomasi(IC), Luiz Fernando Belchior(PG), Tiago Elias Frizon (PQ)*

Universidade Federal de Santa Catarina

clara.holthausen@gmail.com ; tiago.frizon@ufsc.br

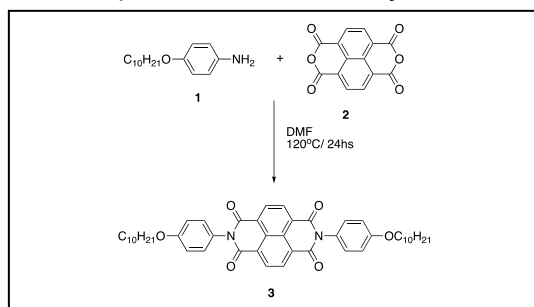
Palavras Chave: Célula Solar. Bateria. Semicondutor Orgânico. Naftalenotetracarboximida.

Introdução

A demanda mundial por energia tem aumentado significativamente nos últimos anos, impulsionando uma busca por novas fontes de energia para suprir o consumo. Atualmente é muito discutido sobre fontes de energia renovável, com foco na energia solar e nas células solares de terceira geração [1]. Destaca-se o potencial de novos materiais[2], como a naftalenotetracarboximida (NDI), para melhorar a eficiência e reduzir custos em células solares de película fina. Além disso, o NDI possui a capacidade de ser usado em eletrodos de bateria de alto desempenho com diferentes íons.

Resultados e discussão

O procedimento de síntese das moléculas consiste no acoplamento do NTCDA com uma amina por meio de uma condensação imídica, levando a formação do composto **3** desejado. O processo de síntese utiliza um sistema de banho de óleo com agitação mecânica sob refluxo durante 24hs. Após esse tempo, o sistema é filtrado a vácuo, seco em estufa e purificado através de coluna cromatográfica, obtendo o composto desejado com rendimento de 82%. A aplicação de corantes de perileno foi demonstrada projetando uma bateria de Al e um cátodo orgânico baseado em corante de perileno sendo a capacidade de descarga a 1500 mA g^{-1} para o composto **3** de 157.3 mAh g^{-1} e a capacidade reversível dos eletrodos obtidos diminuíra do valor inicial após 15 ciclos, correspondendo a uma retenção de 53,5%.



Esquema 1: Metodologia utilizada para a síntese do Composto **3**.

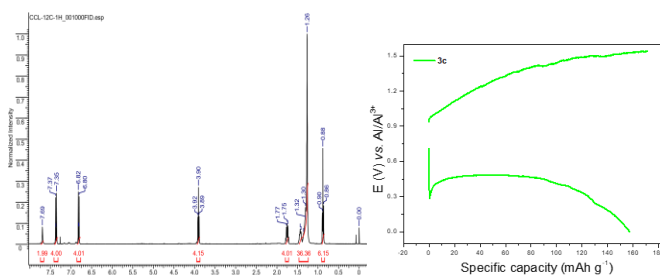


Figura 1: Espectro de RMN ^1H do composto **3** e curvas de carga-descarga galvanostática para a célula obtida.

Conclusões

Neste trabalho, é proposta e implementada a síntese de um novo derivado de NDI em elevado rendimento e com potenciais aplicações em células solares e baterias. As caracterizações estruturais, através de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de ^1H e ^{13}C , foram realizadas e demonstradas, assegurando que o composto desejado foi produzido com sucesso. Realizou-se a análise eletroquímica do composto e a montagem de baterias, atestando reversibilidade de carga descarga indicando possíveis aplicações tecnológicas.

Agradecimentos

UFSC, CNPq, FAPESC e LMA pelo desenvolvimento do projeto.

Referencias e notas

- [1] ELY, F.; SWART, J. W. Energia solar fotovoltaica de terceira geração. O Setor Elétrico - Espaço do IEEE, p. 138–139, 2014. Disponível em: <https://www.ieee.org.br/espaco-ieee/> Acessado em: 16 de Agosto de 2023
- [2] SILVA C, JESUS D, GIROTTO G. Green chemistry and the periodic table by anastas and zimmerman: translation and alignment with a sustainable development. New Chemistry, v. 45, n. 8, p. 1010 - 1019, 2022.

Desenvolvimento de tintas com atividade antimicrobiana utilizando diferentes redutores

Maria Clara Lima Oliveira¹ (IC), Natália Preve¹ (IC), Luiz Belchior¹ (PQ), Suelen da Silva¹ (PG), Shirley Kuhnen¹ (PQ), Tiago Frizon¹ (PQ)*

tiago.frizon@ufsc.br

¹Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC)

Palavras Chave: Nanopartículas de prata, Tintas.

Introdução

As nanopartículas de prata (AgNPs) são de grande interesse principalmente por suas propriedades contra bactérias, fungos e vírus^{1,2}. Estudos recentes revelam que as AgNPs são eficazes no combate do SARS-CoV-2, causador da Covid-19³. Por conta do alto contágio do vírus e do tempo de meia vida prolongada em diversos locais, gerou o interesse no desenvolvimento de tecnologias para reduzir sua disseminação. Neste trabalho, realizou-se um estudo para o desenvolvimento de tintas que pudessem ter alguma atividade antimicrobiana.

Resultados e discussão

As reações das nanopartículas foram realizadas com os redutores borohidreto de sódio (NaBH₄), citrato de sódio e ácido ascórbico, seguindo a metodologia de Turkevich⁴ com adaptações, as quais apresentaram banda plasmônica no comprimento de onda de 402nm, 424nm e 440nm, respectivamente. As reduções com citrato de sódio e ácido ascórbico mostraram espectros de absorção mais intensos e estreitos do que o espectro obtido com NaBH₄, indicando serem redutores mais eficientes e dando mais estabilidade nas reações. Na figura 1a são apresentados os espectros de absorção das AgNPs obtidas através dos 3 redutores. Após a obtenção das AgNPs com os 2 melhores redutores, foi realizada a mistura da solução contendo as NPs em tinta base d'água. Para isso, variou-se a quantidade de NPs adicionadas na tinta, com o intuito de avaliar a eficiência na atividade bactericida das tintas obtidas, conforme figura 1b. As AgNPs reduzidas com citrato de sódio mostraram um maior potencial antimicrobiano, demonstrada pela redução da Concentração Inibitória Mínima (CIM) para 12,5% (v/v), na figura 1c, comparada as reduzidas com ácido ascórbico (CIM=25%), tabela 1.

Tabela 1. CIM das AgNPs reduzidas com citrato de sódio ou ácido ascórbico contra *Staphylococcus aureus* (ATCC25923).

Nanopartículas de prata	CIM (v/v)
AgNPs citrato de sódio	12,5%
AgNPs ácido ascórbico	25%

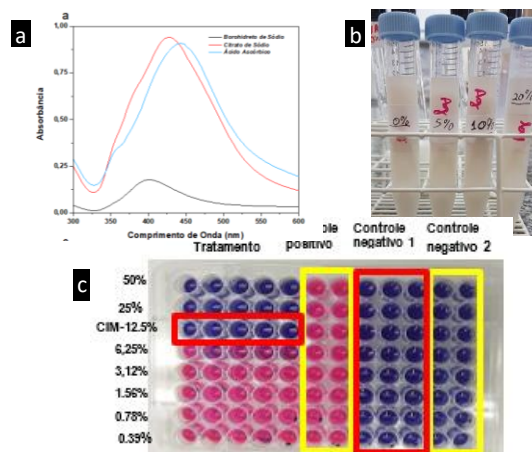


Figura 1. a) Espectro UV-Vis comparativo dos redutores empregados. b) Imagem das soluções preparadas contendo a tinta em diferentes proporções da solução de AgNPs, c) Microplaca revelada com o corante resazurina indicando a ausência (cor azul) e presença (cor rosa) de crescimento bacteriano após exposição à diferentes concentrações de AgNPs.

Conclusões

Realizou-se a síntese e caracterização das AgNPs a partir de 3 metodologias, mas foi indicado como os melhores redutores: Citrato e Ácido Ascórbico. As nanopartículas obtidas pelas duas metodologias apresentaram tamanho médio de 42 nm sendo empregadas na produção das tintas e os resultados foram satisfatórios.

Agradecimentos

Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC) através do Laboratório de Materiais Avançados (LMA) e PIBIC/CNPq.

Referências e notas

- (1) GUZMÁN, M.G.; et al., 2009. Synthesis of silver nanoparticles by chemical reduction method and their antibacterial activity. *International Journal of Chemical and Biomolecular Engineering*, 2:104-111.
- (2) PETICA, A.; et al., 2008. Colloidal silver solutions with antimicrobial properties. *Materials Science and Engineering B*, 152:22-27.
- (3) PRINCE ALLAWADHI, et al., 2021. Silver nanoparticle based multifunctional approach for combating COVID-19, *Sensors Internacional*, Volume 2, 2021, 100101.
- (4) TURKEVICH J, et al., A study of the nucleation and growth processes in the synthesis of colloidal gold, *Discussions of the Faraday Society*, 11 (1951) 55–75.

ATIVIDADE ANTIMICROBINA E ANTIBIOFILME DO EXTRATO DA FLOR DE *Leonotis nepetifolia*

Prof^a. Dr^a. Ionara Irion Dalcol (PQ), Prof. Dr. Ademir Farias Morel, Luciana de Oliveira Adolpho (PG), Luísa Helena Alves Paz (PG), Débora Fioravante da Silveira (IC)*

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria; ²Departamento de Farmacologia, Universidade Federal de Santa Maria

Palavras Chave: biofilme, inibição, cordão-de-frade

Introdução

Leonotis nepetifolia (L.) R. Br. é uma planta pertencente à família Lamiaceae, popularmente conhecida como conhecida como “cordão-de-frade” ou “cordão-de-São-Francisco”. Na medicina popular ela é utilizada para o tratamento de várias doenças tais como infecções de pele, reumatismo, tosse, dor de estômago e como calmante.

Resultados e discussão

As inflorescências de *L. nepetifolia* (L.) R. Br. foram separadas e secas em estufa de circulação de ar na temperatura de 45 – 50 °C por 7 a 10 dias e, após de totalmente secas, foram pulverizadas em moinho tipo de facas. O pulverizado foi submetido a maceração com metanol 100% por 5 dias consecutivos, com troca de solvente a cada 24h. A solução extrativa foi concentrada a vácuo em evaporador rotatório na temperatura de 45 °C para obter o extrato bruto (CEF; 111.79 g; 3.36% de rendimento). A partir de CEF (53.4 g), fez-se o fracionamento com adição de n-hexano, resultando na fração n-hexano (FHF; 15.01 g, 28%), e a fração acetato de etila (FAF; 8.2 g, 15.29%). Para a atividade antimicrobiana, foram utilizadas bactérias padrões “American Type Culture Collection”. O ensaio foi realizado em triplicata empregando ampicilina como padrão antimicrobiano. As placas foram incubadas em estufa a 35°C por 24 horas. Ao final do período de incubação, adicionou-se solução 0.125% de 2,3,5-trifeniltetrazólio cloreto e a turbidez foi determinada em leitor de microplacas no comprimento de onda de 620 nm (CLSI, 2017, 2018). As frações do extrato de flores de LN foram capazes de inibir as bactérias patogênicas resistentes *Escherichia coli*, *Klebsiella pneumoniae*, *Pseudomonas aeruginosa* (CIM de 250 µg mL⁻¹) e *Proteus mirabilis* (CIM de 125 µg mL⁻¹), que são bactérias Gram-negativas naturalmente mais resistentes a ação dos antibióticos devido a sua

bicamada lipídica e produção de enzimas como as β-lactamases, além de serem formadoras de biofilme. Os efeitos de inibição e interrupção do biofilme de *Klebsiella pneumoniae* pelo extrato bruto, fração n-hexano e fração acetato de etila de flores de *Leonotis nepetifolia* foram avaliados pelo método de coloração do cristal violeta (Ta et al., 2014).

Conclusões

Conclui-se que dentre as amostras testadas, FAF foi a que apresentou melhor capacidade inibitória, principalmente nas menores concentrações testadas (31.25 e 62.5 µg mL⁻¹) onde a inibição de formação do biofilme foi de 44.3%, enquanto o controle ampicilina apresentou inibição de 19.4%.

Agradecimentos

À orientadora, à pós-graduanda, aos colegas de iniciação científica, aos fomentadores do projeto FAPERGES e CNPq e à Universidade Federal de Santa Maria.

Referencias e notas

- (1) CLSI. (2017). Reference Method for Broth Dilution Antifungal Susceptibility Testing of Yeasts. In CLSI standard M27. Wayne, PA: Clinical and Laboratory Standards Institute (4 th).
- (2) CLSI. (2018). Susceptibility Testing of Mycobacteria, Nocardia spp., and Other Aerobic Actinomycetes. In CLSI standard M24. Wayne, PA: Clinical and Laboratory Standards Institute (3 rd).
- (3) Ta, C. A., Freundorfer, M., Mah, T. F., Otárola-Rojas, M., Garcia, M., Sanchez-Vindas, P., Poveda, L., Maschek, J. A., Baker, B. J., Adonizio, A. L., Downum, K., Durst, T., & Arnason, J. T. (2014). Inhibition of bacterial quorum sensing and biofilm formation by extracts of neotropical rainforest plants. *Planta Medica*, 80(4), 343–350. <https://doi.org/10.1055/s-0033-1360337>

RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE ^1H PARA DETERMINAÇÃO DA QUANTIDADE DE CONFÔRMEROS DE [2]ROTAXANO EM SOLUÇÃOVitor de Arruda Kessler¹(IC)*, Gustavo Henrique Weimer¹(PG), Fellipe Freire Santos Farias¹(PG), Marcos Antonio Pinto Martins¹(O).E-mail: kesslervitor@gmail.com*¹Núcleo de Química de Heterociclos (NUQUIMHE), Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria (UFSM).Palavras Chave: Máquinas moleculares, [2]Rotaxanos, ^1H VT-RMN, Rotâmeros.

Introdução

As busca por novos modelos de máquinas moleculares, em especial os rotaxanos são de grande interesse, devido as suas características únicas de dinâmica molecular.¹ Os rotaxanos consistem em um componente em forma de halter que incorporam um ou mais locais de reconhecimento em sua seção, circundados por um ou mais componentes ciclicos.¹ Experimentos de Ressonância Magnética Nuclear de ^1H são fundamentais para este tipo de molécula, não apenas por elucidar o composto, mas também para estudos de dinâmica molecular através de técnicas de variação de tempo, temperatura e concentração, permitindo verificar a quantidade dos confôrmers em solução e até mesmo a energia de ativação do movimento de rotação.^{2,3}

Resultados e discussão

Neste projeto, o [2]rotaxano estudado apresenta três confôrmers distintos *E/E*, *E/Z* e *Z/Z* (Figura 1). No entanto, a quantidade dos mesmos se altera em solução e no estado sólido. Essa mudança se deve ao equilíbrio químico em solução, modulado possivelmente pelas interações intercomponente e intermoleculares. No estado sólido a conformação predominante é a *Z/Z*. Em solução observou-se que corre uma variação das conformações, saindo do estado sólido até atingir-se um equilíbrio químico das espécies. Nota-se que com a variação do tempo, as conformações *E/Z* e *E/E* crescem e a conformação *Z/Z* diminui (Figura 2).

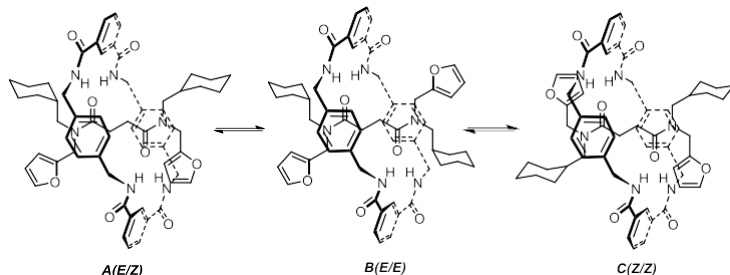


Figura 1. Confôrmers observados na molécula de [2]Rotaxano.

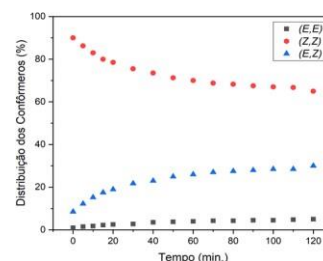


Figura 2. Distribuição de confôrmers em solução ao longo do tempo.

Conclusões

Após o experimento de 120 minutos em solução com o solvente CDCl_3 , observou-se uma diferença da distribuição dos confôrmers (Tabela 1).

Tabela 1. Distribuição dos confôrmers ao longo do tempo.

	Tempo (min.)	5	60	120
		Distribuição (%)		
Confôrmers	(E/Z)	8,5	27	30
	(E/E)	1	3	5
	(Z/Z)	90,5	70	65

No entanto, há muito a ser esclarecido, principalmente a parte do equilíbrio químico estabelecido pelas interações intercomponentes e como as mesmas atuam em solução após um certo período de tempo, tornando cada vez mais instigante e promissor o estudo da dinâmica molecular em [2]rotaxanos.

Agradecimentos

Agradecimentos ao NUQUIMHE, UFSM, FAPERGS, CNPQ e CAPES.

Referências e notas:

- (1) Balzani, Vincenzo, Marcos Gómez-López, and J. Fraser Stoddart. *Accounts of Chemical Research*, 405-414, 1998.
- (2) Orlando, Tainára, et al. *European Journal of Organic Chemistry*, v. 2018, n. 36, p. 4978-4990, 2018.
- (3) Fellipe F.S. Farias, et al. *Journal of Molecular Liquids*, v. 385, 2023.

Síntese de novos selenoesteroides e análise da interação com o DNA.

Natã Marcon Carniel¹ (IC)*, Angélica Medeiros de Costa¹ (PG), Tiago Elias Allievi Frizon¹ (PQ)*.

carnielnata@gmail.com; tiago.frizon@ufsc.br.

¹Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC)

Palavras Chave: Colesterol. Selênio. DNA. Disseleneto.

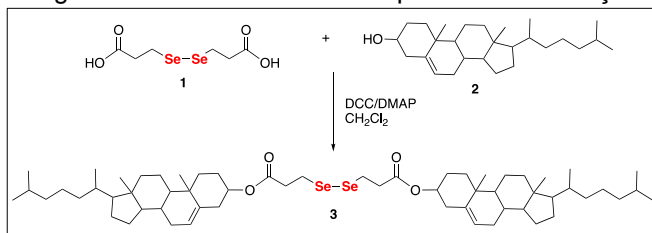
Introdução

As moléculas orgânicas e inorgânicas podem interagir com o DNA por meio de ligações covalentes ou diretamente com suas bases nitrogenadas, impactando funções celulares e processos fisiológicos. Os radicais livres, têm papel vital no metabolismo e saúde. Este estudo explora como a incorporação de selênio no esteroide colesterol afeta interações com o DNA.

Resultados e discussão

O processo de síntese dos compostos inicia com a obtenção do disseleneto alquílico, seguido pelo acoplamento com o esteroide colesterol. O disseleneto foi obtido através da adição de boro hidreto de sódio a uma solução de selênio e água, seguida por aquecimento e extração com solventes orgânicos. A síntese do composto final envolveu a esterificação do ácido 3,3'-Diselenobispropionico (**1**) com o colesterol (**2**), utilizando o sistema DCC/DMAP em diclorometano seco, levando a obtenção do composto (**3**) com rendimento de 88%.

A interação desse composto com o DNA foi analisada por titulação espectrofotométrica, revelando uma interação de hiper Cromia relacionada a interações no sulco e a intercalação com o DNA. As características hidrofóbicas da unidade colesterol e das bases nitrogenadas do DNA contribuem para essas interações.



Esquema 1. Síntese do composto final desejado.

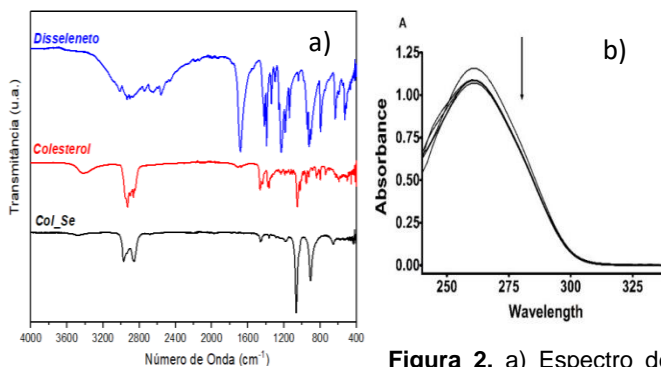


Figura 2. a) Espectro de FTIR comparativo do composto obtido a partir do esteroide colesterol e disseleneto; b) resultados da interação entre o composto e o DNA, analisada por titulação espectrofotométrica de varredura.

Conclusões

A metodologia empregada na síntese do composto final desejado demonstrou alta eficácia, resultando em elevados rendimentos e estruturas completamente caracterizadas por análises de RMN ¹H, RMN ¹³C e FTIR. A avaliação da interação com o DNA revelou efeitos hiper Cromia para o composto contendo colesterol e disseleneto, indicando interação no sulco do DNA.

Agradecimentos

Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), Laboratório de Materiais Avançados (LMA) e PIBIC/CNPq.

Referências e notas

- (1) Frizon, Tiago Elias Allievi. Selenetos e disselenetos contendo n-heterociclos ou colesterol. [Tese]: novas classes de materiais funcionais. Florianópolis, SC, 2012.
- (2) NASCIMENTO, Vanessa do. Atividade de selenetos e selenóxidos como miméticos da enzima glutationa peroxidase. Dissertação de Mestrado. Florianópolis, SC, 2011. 116p.

Controle da Hidratação de UHPC Por Ressonância Magnética Nuclear

Laura Santos¹ (IC)*, Bruni Salete Maboni¹ (IC), Rosangel Rojas² (PQ), José Rafael Yopez² (PQ), Rosilene Clementin¹ (PQ), Diego Cabrera¹ (PQ), Vania Rodrigues de Lima¹ (PQ). llauurasantos.furg@gmail.com

¹Escola de Química e Alimentos, Programa de Pós-Graduação em Química Tecnológica e Ambiental, ²Escola de Engenharia, Núcleo de Estruturas, Universidade Federal do Rio Grande - Av Itália km 8 sn Carreiros, Rio Grande - 96203 900

Palavras Chave: UHPC, óleo de tungue, RMN de ¹H, corrosão, hidratação.

Introdução

É importante pesquisar ferramentas que minimizem a corrosão de materiais como o Concreto de Ultra Alto Desempenho (UHPC). Neste contexto, o uso de materiais “auto-cicatrizantes” tem proporcionado concretos com mecanismos de auto-cicatrização (SEIFAN et al., 2018). O óleo da semente de tungue (*Vernicia fordii*, OT) tem baixo custo (BANASZKIEWICZ, CZECHOWSKI, 2020), e pode prover a capacidade de auto-regeneração do concreto, retardando seu processo de corrosão (SAMADZADEH et al., 2011). Estudar a hidratação, o processo de endurecimento e aumento da resistência da pasta de UHPC e componentes é necessário para compreender o desempenho dos materiais. Este trabalho avaliou a cinética de hidratação de um UHPC na presença de OT por Ressonância Magnética Nuclear de Hidrogênio (RMN de ¹H).

Resultados e discussão

Foram testadas duas concentrações diferentes de UHPC fraturado e moído. Nestas concentrações, também foram comparadas amostras na ausência e na presença de 1g e 2 g de OT. Dados de tempo de relaxação longitudinal (T_1) mostraram que o UHPC na concentração de 15 $\mu\text{g/mL}$ teve redução dos valores de T_1 proporcional ao aumento da razão gel (concreto)/espaço (poros), referente ao preenchimento de poros com a água ao longo do tempo (Jin et al., 2019). Este comportamento não foi observado para o UHPC na concentração de 7 $\mu\text{g/mL}$. Os dados de T_1 de ¹H de UHPC a 15 $\mu\text{g/mL}$ contendo 1 g e 2 g de OT indicaram que, mesmo que o tempo de hidratação pareça ter importante influência nas propriedades do UHPC, outros efeitos característicos do OT e aquém do preenchimento dos poros do UHPC por água podem ser determinantes para as mesmas. É possível que ocorra um efeito plastificante devido à polimerização do glicerídeo de ácido alfa-eleosteárico, seu componente principal (YONGSHANG et al., 2009). Entretanto, mais

estudos espectroscópicos são necessários para confirmar esta hipótese.

Conclusões

Os resultados obtidos permitiram correlacionar a eficiência de novos UHPC na presença de OT no que tange às suas propriedades e a associação com a cinética de hidratação, a partir de estudos de interações intermoleculares, contribuindo para o planejamento e geração de materiais competitivos de alta durabilidade e qualidade, de baixo custo de manutenção.

Agradecimentos

CNPq/FAPERGS/CAPES.

Referencias e notas

1. Seifan M, Sarmah AK, Ebrahiminezhad A, Ghasemi Y, Samani AK, Berenjian A. Bio-reinforced self-healing concrete using magnetic iron oxide nanoparticles. *Appl Microbiol Biotechnol*, 2018.
2. Banaszkiwicz K, Czechowski F. Tung oil as an effective modifier for sulfur polymer cement and its performance in galvanic waste encapsulation. *Heliyon*, 2020.
3. Samadzadeh M, Hatami Boura S, Peikari M, Ashrafi A, Kasiriha M. Tung oil: An autonomous repairing agent for self-healing epoxy coatings, *Progress in Organic Coatings*, 2010.
4. Jin D, Lang Z, Yao W. Analysis of Early Performance of Cement Paste by Low Field NMR. *Applied Sciences*, 2019, 896.
5. Yongshang Lu, Richard C. Larock. Novel Polymeric Materials from Vegetable Oils and Vinyl Monomers: Preparation, Properties, and Applications. *ChemSusChem* 2009, 2, 136 – 147. .

Síntese de inibidores da esfingomielinase ácida selênio e tio substituídos

Pedro José Tronco Pauletto^{1*} (IC) e João Batista Teixeira da Rocha¹ (PQ).Contato: pedro.pauletto@acad.ufsm.brDepartamento de Bioquímica Toxicológica, Universidade Federal de Santa Maria¹

Palavras Chave: Inibição, enzima, selênio, FIASMAs, síntese, ASM.

Introdução

A esfingomielinase ácida (*acid sphingomyelinase* - ASM) é uma enzima humana responsável pela catálise de esfingomielina em ceramida no interior do lisossomo. Recentemente, essa enzima foi relacionada com inibição viral, especialmente do vírus causador da recentemente pandemia, o SARS-CoV-2¹. Nosso grupo de pesquisa especialmente contribuiu com análises *in silico* relativas aos mecanismos de infecção viral².

Uma classe de moléculas anfifílicas denominada FIASMAs (*functional inhibitors of acid sphingomyelinase*) é capaz de inibir a ASM, portanto combatendo a infecção viral¹.

Outra rota inibitória bem conhecida para o SARS-CoV-2 é a inibição de sua protease principal (M^{pro}) e a protease similar a papaína (PL^{pro}), que possuem sítio ativo contendo cisteína³.

Nesse trabalho, buscamos realizar a síntese de derivados selênio e tio substituídos da fluoxetina, um conhecido FIASMA, cujas análises prévias *in silico* de nosso grupo mostraram ser promissoras^{2,3}. Os precursores desses compostos também foram demonstrados como alternativas para a inibição da M^{pro} e PL^{pro} na literatura.

Resultados e discussão

Realizamos a síntese de derivados da fluoxetina a partir do cloreto de 3-cloro-N,N-dimetil-3-fenilpropan-1-aminio (1) e de disselenetos e dissulfetos fenílicos substituídos na presença de borohidreto de sódio e KOH. Os dicalcogenetos foram preparados de acordo com a literatura, enquanto 1 foi preparado a partir de uma reação de *Mannich* com acetofenona, formaldeído e dimetilamina. Os produtos foram purificados por cromatografia em coluna (acetato de etila/hexano 1:10).

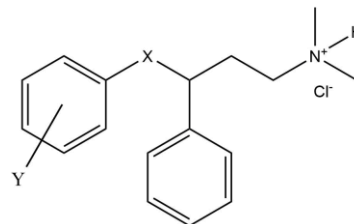


Figura 1. Estrutura dos derivados de fluoxetina. X = S, Se; Y = H, mesitol, p-Cl, p-CF₃, o-CF₃, o-Me, o-OMe. Também se utilizou o grupo 2-naftaleno diretamente ligado a X.

Após isolados, os dicalcogenetos e os derivados de fluoxetina foram encaminhados para a UnB (Universidade de Brasília) para testes *in vitro* contra o SARS-CoV-2.

Nosso grupo também realizou simulações de docking para todos em compostos (como ligantes) com as enzimas ASM e M^{pro}. Os resultados mostram forte interação com os sítios inibitórios das proteínas.

Conclusões

Nós sintetizamos com sucesso compostos que mostram forte potencial inibitório de enzimas relacionadas a replicação viral do SARS-CoV-2. A presença de selênio na estrutura dessas drogas pode trazer perspectivas para o desenvolvimento de novas classes de compostos organosselenados no futuro.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio do CNPq e da CAPES. P.J.T.P. foi financiado pelo PIBIC, F.B.O., J.B.T.R., C.P.D. e P.A.N., foram financiados pela CAPES.

Referências e notas

- (1) Pauletto PJT, Delgado CP, da Rocha JT. *Cell Biochem Funct.* 2023;1-12
- (2) Pauletto P, Bortoli M, Omege FB, Delgado CP, Nogara PA, Orian L, da Rocha JBT. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics* 2022; 1-14
- (3) Pauletto P, Delgado CP, Omege FB, da Rocha JT. a. 2022; 1-12

Atributos físico-químicos de méis produzidos nos Campos de Cima da Serra do Estado do Rio Grande do Sul

Bruna Bento Drawanz¹(PQ), Luana Hofmam Cavalheiro¹(IC), Jefferson Prigolli¹(IC), Fernanda Magalhães Stalliviere¹(PQ). *bruna-drawanz@uergs.edu.br*

Laboratório de Química e Alimentos, Universidade Estadual do Rio Grande do Sul (Uergs) Unidade Universitária em Caxias do Sul
 Palavras-Chave: Condições edafoclimáticas; apicultura; qualidade de alimentos.

Introdução

O mel é um produto natural com propriedades nutraceuticas. Em 2021, aproximadamente 56 mil toneladas de mel foram produzidas no Brasil, sendo o Estado do Rio Grande do Sul (RS) o segundo maior produtor nacional, responsável por 17 % desta produção.¹ Os méis variam em características conforme a florada da qual o néctar é extraído. A florada, por sua vez, tem suas características influenciadas pela espécie vegetal produtora, a qual é afetada pela origem geográfica, características ecológicas e condições edafoclimáticas e estádios de maturação. Estes fatores levarão a variação de composição química dos méis afetando as propriedades e tornando o méis de cada região únicos.²

Sabe-se que as regiões do Brasil variam bastante em condições edafoclimáticas o que pode ser um determinante quanto aos diferentes tipos de méis produzidos por diferentes regiões do país. A região dos Campos de Cima da Serra (CCS) do RS, está dentro do Bioma Mata Atlântica, com características ambientais únicas sendo de suma importância a caracterização química e físico-química dos méis produzidos na região para agregar valores de autenticidade artesanal aos produtos em que o mel for inserido. O Objetivo do trabalho foi caracterizar físico-quimicamente méis produzidos nos CCS/RS.

Resultados e discussão

Na fase inicial do projeto foram determinados: o teor de sólidos solúveis (SS), a umidade, o pH, a acidez livre (AL), o teor de açúcares redutores (AR) e não redutores (ANR), aplicando os protocolos para análise de alimentos preconizados na literatura³ para 8 amostras de méis colhidos por apicultores locais no ano de 2023 (Tabela 1).

Os dados obtidos foram comparados com a legislação brasileira que regulamenta os atributos de qualidade dos méis.⁴ Três amostras apresentaram o teor ANR acima do limite da legislação (máximo de 6%). Isso pode estar associado a uma colheita prematura dos méis.

Os méis do CCS/RS apresentam maior acidez livre, maior teor açúcares redutores e menor porcentagem de

umidade, quando comparados a méis de outras regiões do país e estado.^{5,6}

Tabela 1. Análises físico-químicas de méis provenientes dos CCS/RS.

Amostra	SS °Brix	Umidade %	pH	AL mEq/Kg	AR %	ANR %
1	82	17,5	4,2	32,3	68,9	5,4
2	82	17,5	4,1	30,1	75,2	6,2
3	81	17	4,0	34,7	76,9	1,6
4	81	17	4,1	30,8	65,0	7,1
5	81,5	17	3,9	31,7	72,4	4,2
6	80,0	18	3,9	25,3	71,4	4,1
7	80,5	18	4,3	24,9	64,5	6,1
8	82,5	16	4,1	26,6	73,6	0,8
Média	81,3	17,2	4,1	29,5	71,0	4,3

Conclusões

No trabalho, foi possível determinar parâmetros físico-químicos característicos e únicos dos méis dos CCS/RS, oriundos da florada silvestre do Bioma Mata atlântica.

Agradecimentos

Associação de Apicultores de Vacaria (AVAPIS)

Referencias e notas

- (1) Associação Brasileira de Estudos de Abelhas (ABELHA). *Atlas da Apicultura no Brasil*. 2023. Disponível em: <https://abelha.org.br/atlas-da-apicultura-no-brasil/>
- (2) YAYINIE, M. *et al. Int. J. Food Prop.* **2022**, 25(1), 79.
- (3) Instituto Adolf Lutz (IAL). (2008). *Métodos físico-químicos para análise de alimentos*. 4º Ed., - São Paulo: Instituto Adolfo Lutz, p. 1020
- (4) BRASIL. Instrução Normativa Nº 11, de 20 de Outubro de 2000. Aprova o Regulamento Técnico de Identidade e Qualidade do Mel.
- (5) MOURA, L. R. *et al. Rev. Gestão em Foco*, **2017**, 9, 240.
- (6) RICHTER, W. *et al. Alim. Nutr.* **2011**, 22, 547.

SÍNTESE E AGREGAÇÃO DE LÍQUIDOS IÔNICOS MONO E DICATIÔNICOS DERIVADOS DE AMINOÁCIDOS (LIAAs)

Milena De Nardin (IC)^{1*}, Amanda Cargnin de Moraes (IC)¹, Vinicius Dalcin Lacorte (IC)¹, Thaíssa Silva Beck (PG)¹, Leticia Zibetti (PG)¹, Clarissa Piccinin Frizzo (PQ)¹. mdnardin@gmail.com

¹Núcleo de Química de Heterociclos, Departamento de Química, Universidade Federal De Santa Maria.

Palavras Chave: Líquidos Iônicos, Monocatiônico, Dicatiônico, Aminoácidos, Agregação.

Introdução

Líquidos iônicos (LIs) são sais orgânicos constituídos exclusivamente por íons, conhecidos pela sua habilidade de auto-organização em solução, propriedade esta que pode ser observada de acordo com o aumento gradual da concentração do LI, podendo-se haver a formação de agregados.

O uso de aminoácidos como ânions nos líquidos iônicos mostrou-se muito promissor, pois eles aumentam sua solubilidade em água e influenciam significativamente as características físico-químicas do composto, como as propriedades térmicas, a viscosidade e a polaridade.

Com base nisso, o objetivo desse trabalho foi sintetizar e estudar o processo de agregação dos LIAAs mono e dicatiônicos com o cátion imidazolínio e os ânions glicinato e lisinato (**Figura 1**), analisando o efeito dos ânions ao determinar a concentração de agregação crítica (CAC), utilizando a técnica de DLS (do inglês, *Dynamic Light Scattering*).

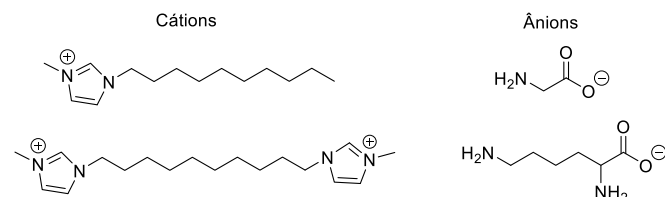


Figura 1. Cátions e ânions dos AAILs utilizados nesse estudo.

Resultados e discussão

O primeiro passo para a síntese dos LIAAs é uma reação de S_N2 entre o 1-metilimidazol e o 1-bromodecano para o monocatiônico, e o 1,10-dibromodecano para o dicatiônico, sob as condições reacionais de agitação magnética constante, 65° C, refluxo e atmosfera inerte por 24 h, formando os precursores [Dec(MIM)][Br] e [BisDec(MIM)₂][2Br]. Após, passou-se os LIs precursores por uma resina de troca iônica (Amberlite IRN 78 HYDROXIDE FORM) ambientada com NaOH 1 mol.L⁻¹, afim de trocar os íons

brometo (Br⁻) por íons hidroxila (OH⁻). Em seguida, depois da troca total dos íons, reagiu-se os compostos com os aminoácidos escolhidos, na proporção de 1:1 e 1:2 para o mono e o dicatiônico, respectivamente, levando a formação dos LIAAs [Dec(MIM)][GLI], [Dec(MIM)][LIS], [BisDec(MIM)₂][2GLI] e [BisDec(MIM)₂][2LIS].

Para análise de DLS preparou-se uma solução 200 mM de cada LIAA, todas as medidas foram realizadas a 25° C no ângulo de 90°, os resultados obtidos estão apresentados na tabela 1.

Tabela 1. Dados de CAC dos LIAAs.

LIAAs	CAC (mmol)
[Dec(MIM)][GLI]	80
[Dec(MIM)][LIS]	42
[BisDec(MIM) ₂][2GLI]	26
[BisDec(MIM) ₂][2LIS]	17

Conclusões

A síntese para obtenção dos LIAAs mostrou-se eficiente, alcançando um rendimento bom para ambos.

A partir dos dados obtidos através do DLS, foi possível observar que os LIAAs monocatiônicos agregaram em concentrações maiores que seus análogos dicatiônicos. Já, ao comparar os ânions, LIAAs com ânion lisinato são mais hidrofóbicos, fazendo com que a formação de agregados ocorra mais rapidamente.

Agradecimentos

UFSM, FAPERGS, CNPq e CAPES.

Referências e notas

- (1) Beck, T. S.; de Mattos, M.; Jortieke, C. R.; et al. *Journal of Molecular Liquids*, **2022**, *364*, 120054.
- (2) Bender, C. R. Efeito dos ânions de líquidos iônicos dicatiônicos na formação de agregados em solução, **2014**.

Síntese de um novo híbrido imidazol-1,4-dihidropiridina e ancoragem molecular com a kinase Akt1 na busca de potenciais antitumorais

Claudiana Dotti (IC)^{1*}, Isadora B. Pacheco (PG)¹, Rodrigo C. Zefferino (PQ)², Rozangela C. Pedrosa (PQ)², Helena D. de Salles (PQ)³, Diana Lousa (PQ)³, Claudio M. Soares (PQ)³ e Ricardo F. Affeldt (PQ)¹. claudiana.dotti@grad.ufsc.br

¹Laboratório de Catálise e Fenômenos Interficiais – Depto. de Química – UFSC – Florianópolis, Brasil.

²Laboratório de Bioquímica Experimental – Depto de Farmácia – UFSC – Florianópolis, Brasil.

³Protein Modeling Lab – ITQB Nova – UNL – Oeiras, Portugal.

Palavras Chave: 1,4-Dihidropiridina, Multicomponente, Híbrido, Docking, Cancer.

Introdução

As 1,4-dihidropiridinas (1,4-DHP) possuem larga aplicabilidade na química medicinal e estão presentes em fármacos de reconhecida atividade anti-hipertensiva.¹ Além disso, estudos envolvendo a atividade antitumoral deste tipo de heterociclo vem aumentando progressivamente nos últimos anos.² A via de sinalização PI3K/Akt/mTOR desempenha papel essencial no crescimento e sobrevivência celular no câncer de mama e colorretal, sendo a kinase Akt1 um importante alvo terapêutico, o que justifica o emprego de moléculas capazes de inibir a sua atividade.³ Neste trabalho foi realizada a síntese de um híbrido da 1,4-dihidropiridina com imidazol e a ancoragem (*docking*) molecular com a Akt1.

Resultados e discussão

A síntese do derivado da 1,4-DHP (**Figura 1a**) foi realizada através de reação multicomponente de Hantzsch, utilizando maghemita ($\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$) como catalisador, 1 mmol de 2-imidazolcarboxialdeído, 2 mmol de acetoacetato de benzila, excesso de acetato de amônio e etanol como solvente. O produto foi purificado por recristalização em etanol, levando ao produto com 46 % de rendimento.

A estrutura da molécula foi previamente otimizada através de cálculos DFT (B3LYP/6-31G(d)), indicando uma conformação S-trans entre os grupos benzila e uma ligação de hidrogênio intramolecular entre o imidazol e a carbonila ($d_{\text{NH}\cdots\text{O}} = 0,214$ nm, **Figura 1b**). A seguir, esta estrutura foi submetida a ancoragem molecular com a proteína Akt1 adaptada (PDB:4EJN).

energia e a Akt1 modelada na sua forma rígida, com ajuste do estado de protonação das histidinas. O complexo proteína-ligante obtido (**Figura 2**) apresentou estabilidade, com energia de ligação de $-9,4$ kcal.mol⁻¹. Foi observado que a presença de anéis aromáticos na estrutura da 1,4-dihidropiridina apresentou interações *p-stacking* com o triptofano 80 em diferentes poses, sendo este um importante sítio de interação para manter a estrutura inibida da Akt1, relacionada à sua atividade antitumoral. Já o grupo imidazol interagiu com resíduos polares do sítio ativo.

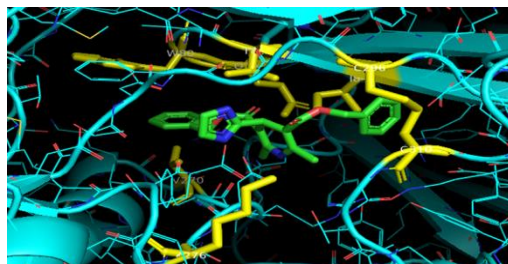


Figura 2. Akt1 (azul) e interações entre resíduos do sítio ativo (amarelo) e o derivado 1,4-DHP (verde).

Conclusões

Foi observado a interação entre o sítio ativo da Akt1 e o composto híbrido 4-(2-imidazolil)-1,4-dihidropiridina sintetizado através de docking molecular. Mais estudos *in silico* e *in vitro* estão sendo realizados para investigar a atividade biológica prevista.

Agradecimentos

À UFSC, CNPq, CAPES, INCT-Catálise e FAPESC.

Referências e notas

- (1) GHOSH, S., et al. **2013**. *Tetrahedron Lett.*, 54(1), 58-62
- (2) MANNA, D., et al. **2018**. *Apoptosis*, 23, 532-553
- (3) ASHWELL, M. A. et. al., **2012**. *J. Med. Chem.*, 55(11) 5291-5310

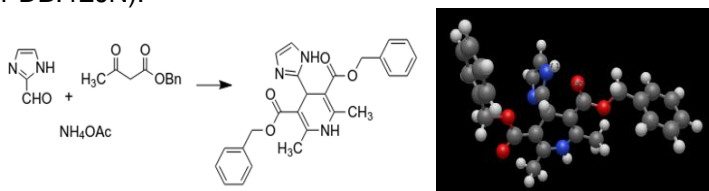


Figura 1. (a) Síntese do híbrido 4-(2-imidazolil)-1,4-dihidropiridina e **(b)** estrutura tridimensional de menor energia otimizada.

A ancoragem foi realizada com o auxílio do software AutoDockTools e AutoDockVina, considerando as rotações sigma do heterociclo a partir da conformação de menor

Proposta de Mecanismo de Nucleação de Álcoois Benzílicos Halogenados a partir de dados Supramoleculares Energéticos e Topológicos Teóricos

Patrick Teixeira Campos¹ (PQ)*, Pedro Henrique Cunha Do Couto² (IC), Álex Canez Lemos Souza³ (IC).

patrickcampos@ifsul.edu.br*

Laboratório de Química Orgânica Sintética, Estrutural e Computacional; Instituto Federal Sul-rio-grandense, Campus Pelotas.

Palavras Chave: Cristalização, Interações Intermoleculares, Ligação de hidrogênio, Ligação de halogênio, $\pi\cdots\pi$, DFT-D3.

Introdução

A nucleação é o primeiro passo na formação de uma nova fase termodinâmica ou de uma nova estrutura via auto-montagem ou auto-organização no processo de cristalização.¹⁻³ Este necessita de maiores estudos para obter uma maior compreensão em nível molecular.¹⁻³ Nesse trabalho nós elaboramos o mecanismo de nucleação de alcoois benzílicos halogenados a partir de dados supramoleculares energéticos e topológicos.

Resultados e discussão

A partir de dados de difração de raios-x foram realizados cálculos de DFT pelo método ω B97X-D3 para determinar a energia das interações intermoleculares presentes na primeira esfera de coordenação, a qual determina a etapa 1 ($\pi\cdots\pi$) no mecanismo de nucleação.

a área de contato. Na etapa 2 cadeias supramoleculares interagem de forma dimérica a partir de ligações de hidrogênio (O-H...O). Na etapa 3 interações (C-H...Br) guiam o crescimento supramolecular ao longo do eixo *a*. Na etapa 4 um novo empilhamento π provoca um novo crescimento ao longo do eixo *b*. Por fim, a etapa 5 do mecanismos de nucleação é motivada pela ligação de halogênio Br...Br via σ -hole com crescimento ao longo do eixo *c*.

Figura 2. Mecanismo de nucleação proposto.

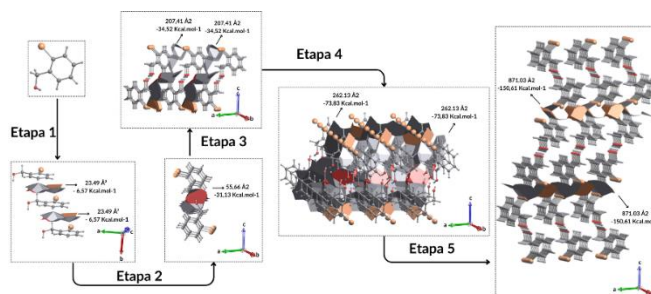


Tabela 1. Energia e áreas das interações intermoleculares.

Dímero	Interações	Energia (Kcal/mol)	%	Energia de interação (Kcal/mol)	Área de contato (Å²)
M1--M2	C-H...H-C	-1,50	39%	-0,59	12,06
	C-H...O		61%	-0,92	
M1--M3	O...H-O	-5,48	100%	-5,48	11,13
M1--M4	Br...H-C		47%	-1,00	15,92
	H...H-C	-2,12	25%	-0,53	
	C...H-C		28%	-0,60	
M1--M5	Br...H-C	-1,55	41%	-0,64	7,76
	Br...Br		59%	-0,91	
M1--M6	C-H...Br	-1,74	100%	-1,74	12,46
M1--M7	C-H...Br		35%	-0,74	15,92
	C-H...H-C	-2,13	31%	-0,66	
	C-H...C		34%	-0,73	
M1--M8	Br...H-C	-1,74	100%	-1,74	12,46
M1--M9	C...H-C		37%	-2,45	23,49
	C...Br	-6,57	31%	-2,02	
	C...C		32%	-2,10	
M1--M10	Br...Br	-1,55	59%	-0,91	7,76
	C-H...Br		41%	-0,64	
M1--M11	C...Br	-2,79	49%	-1,37	13,90
	C...H-C		51%	-1,42	
M1--M12	O...H-C	-1,50	39%	-0,59	12,06
	C-H...H-C		61%	-0,92	
M1--M13	Br...C		31%	-2,03	23,49
	C...C	-6,57	32%	-2,10	
	C-H...C		37%	-2,44	
M1--M14	O-H...O	-5,48	100%	-5,48	11,13
M1--M15	Br...C	-2,79	49%	-1,37	13,90
	C-H...C		51%	-1,42	

Nas etapas seguintes hipóteses de aproximação de estruturas supramoleculares são investigadas conforme

Conclusões

A partir da hierarquia de estabilidade das interações intermoleculares na primeira etapa e das interações supramoleculares das etapas 2-5 foi possível determinar que interações motivam o crescimento da estrutura ao longo dos três eixos.

Agradecimentos

CNPq, FAPERGS e PROPESP-IFSul.

Referencias e notas

- (1) Campos, P. T.; da Rosa, B. F. C.; Hilsinger, H. S.; Milani, M. A.; Krüger, V. U. *Cryst. Growth Des.* **2020**, 20, 6382-6399
- (2) Campos, P. T.; Bones, M. K.; da Silva, R. M. S. *Eur. J. Org. Chem.* **2022**, e202101574.
- (3) Campos, P. T.; Rodrigues, G. M.; Afonso, L. P.; Krüger, V. U.; da Silva, R. M. S.; Milani, M. A. *CrystEngComm*, **2022**, 24, 2667-2678.

Síntese de 3-(4-alcoxifenetil)-5-(trihalometil)isoxazóis derivados da *raspberry ketone* e estudo do potencial antioxidante

Taís B. Goulart* (FM), Adriana M. Neves¹ (PQ), Nycolas S. Gonçalves¹ (IC), Alex F. C. Flores¹ (PQ).
t.barcelosgoulart@yahoo.com.br

Escola de Química e Alimentos - Universidade Federal do Rio Grande - FURG - Avenida Itália, km 08 - Rio Grande - RS – Brasil.

Palavras Chave: Isoxazóis, *Raspberry ketone*, Síntese, Heterociclo, Antioxidante.

Introdução

A *raspberry ketone* ou (4-(*p*-hidroxifenil)-2-butanona), é uma cetona alquílica fenólica natural encontrada na framboesa vermelha. Esse composto bioativo tem inúmeras propriedades biológicas¹ e também contém funcionalidade sintética², para a síntese de heterociclos. A classe dos compostos heterocíclicos tem crescido exponencialmente, principalmente os que contêm N e O, pois detêm inúmeras aplicações na química sintética e medicinal³. Os isoxazóis são heterociclos que possuem relevantes propriedades farmacológicas e biológicas⁴. Dessa forma, o objetivo deste trabalho foi à síntese de isoxazóis derivados da *raspberry ketone* para o estudo da atividade antioxidante.

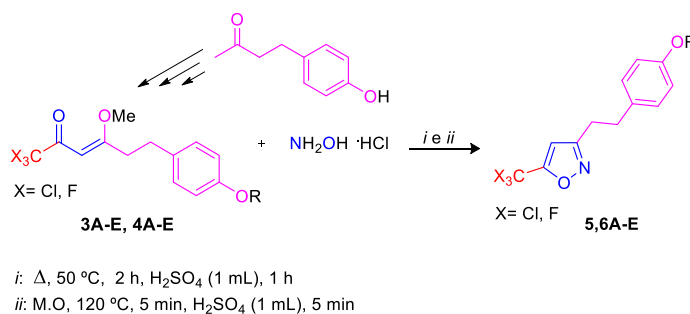
Resultados e discussão

A *raspberry ketone* foi utilizada para a obtenção do precursor 1,3-dieletrofilicos **3,4A-E** (75-90%), o qual foi sintetizado por uma sequência de reações: alquilação², acetalização⁵ e acilação^{5a,b}. Posteriormente, os compostos 1,3-dieletrofilo **3,4A-E** com cloridrato de hidroxilamina em meio ácido, gerou a obtenção dos heterociclos isoxazóis **5,6A-E** a partir da reação de ciclocondensação. A síntese dos isoxazóis **5,6A-E** foi realizada por metodologia de aquecimento convencional^{5b} e metodologia alternativa com o uso do reator de microondas^{5b} Discover-SP (Esquema 1).

Os compostos foram obtidos sem necessidade de purificação, os rendimentos dos isoxazóis **5,6A-E** foi maior na metodologia de microondas com valores de 45-90% comparados a outra metodologia equivalente a 30-68%. Todos os compostos sintetizados foram identificados e caracterizados por análises de RMN ¹H, ¹³C, DEPT 135 e espectrometria de massas (CG/EM).

Para os compostos **5A** e **6A** realizou-se testes antioxidante em DPPH (2,2-difenil-1-picrilhidrazil e ABTS (ácido 2,2'-azino-bis(3-etilbenzotiazolina-6-sulfônico)), com o intuito de verificar se o potencial antioxidante seria mais eficiente em compostos com o halogênio clorado ou fluorado. Os compostos **5A** apresentaram atividade significativa nos testes antioxidante em DPPH e ABTS.

Esquema 1: Reação para a obtenção dos isoxazóis **5,6A-E**.



	3A-E	4A-E		A	B	C	D	E		5A-E	6A-E
X	Cl	F	R	Me	Et	But	Hex	Bz		Cl	F

Conclusões

A síntese dos isoxazóis **5,6A-E** foi eficiente para a obtenção de uma série de dez compostos inéditos na literatura. De acordo com a porcentagem de inibição verificou-se que os compostos **5A** tem potencial antioxidante em DPPH e ABTS na concentração de 25 µM, quando comparados com o controle e com a RK na mesma concentração.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, FURG, CIA-FURG, NEESH, Laboratório de biomarcadores (UFPEL).

Referências

- (1) Morimoto, C.; Satoh, Y.; Hara, M.; Inoue, S.; Tsujita, T.; Okuda, H. *Life Sci.* **2005**, *77*, 194.
- (2) Katrizky, A. R.; Rees, C. W. *CHEC II*, ed.: N Y, **1996**, *4*, 47.
- (3) Kauthale, S.; Tekale, S.; Damale, M.; Sangshetti, J.; Pawar, R. *Med. Chem. Res.* **2017**, *184*.
- (4)(a) Zhang, L.; Wang, Y.; Shi, Y.; Wu, Y.; Lan, J.; Ma, W.; You, J. *ACS Catal.* **2019**, *9* (6), 5358. (b) Zhou, M.; Ni, C.; He, Z.; Hu, J. *Org. Lett.* **2016**, *18* (15), 3754.
- (5)(a) Bareño, V. D. O.; Santos, D. S.; Frigo, L. M.; Mello, D. L.; Malavolta, J. L.; Blanco, R. F.; Pizzuti, L.; Flores, D. C.; Flores, A. F. C. *J. Braz. Chem. Soc.* **2020**, *31*, 264. (b) Goulart, T. B.; Neves, A. M.; Soares, M. S. P.; Stefanello, F. M.; Campos, P. T.; Moura, S.; Cargnelutti, R.; Flores, A. F. C. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2020**, *56*, 1320.

Planejamento, síntese e avaliação do potencial antitumoral e antioxidante dos compostos aciltioureas

Renieidy Flávia C. Dias (PG)², Ianka J. Nunes (PG)¹, Taise C. Nunes (IC)², Malick F. Dabo (IC)¹, Mariana A. Paim¹(IC), Ana M. Plutín Stevens (PQ)³, Raúl R. Cairo (PQ)³, Raúl O. M. Castell (PQ)³, Jenifer Saffi (PQ)¹ Adriana Castro Pinheiro (PQ)^{2*}

¹Laboratório de Genética Toxicológica – Universidade Federal de Ciências de Saúde de Porto Alegre (UFCSPA)

²Grupo de Catálise e Estudos Teóricos – Universidade Federal de Pelotas (UFPel)

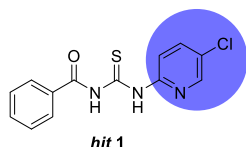
³Universidad de La Habana- Cuba (UH)

*acpinheiro@ufpel.edu.br

Palavras-Chave: Síntese Orgânica; Aciltioureas; Antitumoral.

Introdução

O câncer é descrito como uma família de doenças que envolve processo de crescimento descontrolado de células e está entre as doenças mais difundidas a nível mundial. O presente trabalho buscou sintetizar alguns derivados de aciltioureas que foram planejadas devido a seu potencial antitumoral¹. O *hit* que inspirou a realização desse trabalho apresentou IC₅₀ > 200 mM contra câncer de mama mais agressivo (MDA-MB-231), seguido do câncer de próstata (DU-145) (Figura 1).¹



hit 1

IC₅₀ μM (MDA-MB-231): >200

IC₅₀ μM (DU-145): >200

IC₅₀ μM (L929): >200

Figura 1. Estrutura do *hit* e dados biológicos.

Resultados e discussão

Foram propostas modificações estruturais no núcleo piridina destacado na estrutura química do *hit* (Figura 1).

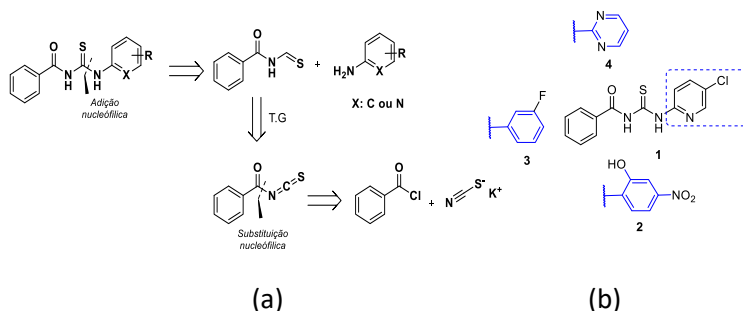


Figura 2. Retrossíntese utilizada para a síntese dos compostos almeçados (a), Modificações estruturais realizadas no *hit* (b).

As modificações foram realizadas utilizando uma única estratégia sintética, conforme reportado na Figura 2a. Na Figura 2b está representado as modificações realizadas no núcleo piridina do *hit*, explorando uma diversidade química e visando obter uma relação estrutura química e atividade biológica. A avaliação da atividade antiproliferativa pelo ensaio MTT dos compostos 3 a 4 nas linhagens celulares humanas MCF-7 revelaram baixa citotoxicidade em todas as concentrações testadas (1 a 100 μM), não tendo IC₅₀ determinado. Já o composto 2 apresentou IC₅₀ de 25,83 ± 2,9 μM para MCF-7 e 16,53 ± 4,1 μM para MRC-5. Estudos de interação dos compostos 2, 3 e 4 com ct-DNA (calf thymus) não indicou intercalação ou interação eletrostática do tipo π-π com as bases do DNA. Na avaliação da atividade antioxidante, o composto 4 foi o que revelou maior capacidade de capturar o radical ABTS⁺ e de capturar o radical livre DPPH, tendo potencial de inibir 50% do cátion radical ABTS⁺ na concentração de 5,84 μM, e tendo potencial de inibir 50% do radical livre DPPH na concentração de 31,83 μM.

Conclusões

Contudo, o resultado é muito promissor para um composto orgânico, evidenciando o potencial antitumoral dessa classe e as notáveis atividades antioxidantes, resultados expressos principalmente através dos compostos 2 e 4.

Agradecimentos

PPGQ/UFPel, CNPq, FAPEMIG, FAPERGS, Gentox e Universidad de La Habana.

Referencias e notas

(1) A.M. Plutín et al. / Polyhedron 184 (2020) 114543

FeCl₃/TBAB como um sistema fotocatalítico para a síntese de benzocalcogenazóis promovida por luz visível

Viviane T. Mena^{1*} (IC), Luiz H. Dapper¹ (PG), Mateus W. Rambo² (IC), Filipe Penteado² (PQ) e Eder J. Lenardão¹ (PQ).

*tessmervivi@gmail.com

¹Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos – CCQFA. Universidade Federal de Pelotas – UFPel. Caixa Postal 354, 96010-900, Pelotas, RS, Brasil.

²Departamento de Química, Centro de Ciências Naturais e Exatas – CCNE, Universidade Federal de Santa Maria – UFSM, Av. Roraima, Prédio 18, 97105-340, Santa Maria, RS, Brasil.

Palavras-chave: Benzotiazóis, Benzosselenazóis, Fotocatálise, Cloreto de Ferro (III), TBAB, Luz visível.

Introdução

Os benzocalcogenazóis são componentes estruturais de uma série de produtos naturais e sintéticos¹ e, devido a suas propriedades farmacológicas², eles têm chamado a atenção dos químicos orgânicos. Dessa forma, faz-se necessário o desenvolvimento de metodologias cada vez mais limpas para preparar esta classe de compostos. Na literatura, normalmente são encontrados relatos da síntese de benzocalcogenazóis utilizando aquecimento convencional.³ Nesse contexto, dentre os doze princípios da Química Verde, a busca pela eficiência energética desempenha um papel fundamental no desenvolvimento de métodos sintéticos sustentáveis⁴, como a utilização de luz visível como fonte alternativa de energia para promover reações químicas. Portanto, neste trabalho foi desenvolvida uma metodologia sintética para a formação de benzotiazóis e benzosselenazóis substituídos partindo de álcoois benzílicos e dissulfetos ou disselenetos de 2-amino fenila. A reação é promovida por luz visível, utilizando um complexo fotoativante de cloreto de ferro (III)/TBAB como sistema catalítico.

Resultados e discussão

Na busca pela condição ideal para sintetizar o 2-fenil benzotiazol (**3a**), inicialmente foi realizado um estudo de otimização onde foram variados parâmetros como quantidades estequiométricas, tempo, tipo de catalisador e luz. A melhor condição obtida foi reagindo 0,25 mmol de dissulfeto de 2-aminofenila (**2a**) e 4 equiv. de álcool benzílico (**1**) na presença de uma mistura FeCl₃/TBAB contendo 15 mol% cada, em 2 mL de MeCN sob irradiação constante de LED azul (50 W) durante 16 h, resultando em 70% de rendimento. Posteriormente, testou-se a aplicabilidade do método para álcoois alifáticos, aromáticos e heteroaromáticos. Como resultados, foram sintetizadas quinze moléculas de benzocalcogenazóis com rendimentos que variaram de 16% a 70% (Figura 1).

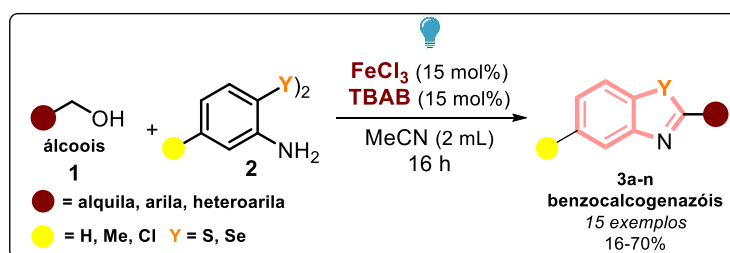


Figura 1. Síntese de benzocalcogenazóis substituídos catalisada pelo complexo FeCl₃/TBAB.

Conclusões

Foi desenvolvida uma nova metodologia sintética utilizando FeCl₃/TBAB como um complexo fotocatalítico barato e eficiente para a síntese de moléculas de alto valor agregado, como os benzotiazóis e benzosselenazóis. A nova estratégia sintética segue os princípios da química verde, especialmente os princípios #6 e #9, que são a busca pela eficiência energética e a catálise.

Agradecimentos

Os autores agradecem aos órgãos de fomento CNPq, CAPES e FAPERGS (ARD 23/2551-0000800-9).

Referências e notas

- (1) (a) Aiello, S.; Wells, G.; Sone, E., et al. *J. Med. Chem.* **2008**, *51*, 5135. (b) Banerjee, A.; Santra, SK.; Guin, S.; Rout, SK.; Patel, BK. *Eur. J. Org. Chem.* **2012**, *2012*, 1367. (c) Banerjee, A.; Bera, A.; Guin, S.; Rout, SK.; Patel, BK. *Tetrahedron* **2013**, *69*, 2175.
- (2) (a) Mortimer, C. G. et al. *J. Med. Chem.* **2006**, *49*, 179. (b) Bondock, S.; Fadaly, W.; Metwally, M. A. *Eur. J. Med. Chem.* **2010**, *45*, 3692.
- (3) Karami, N.; Zarnegaryan, A. *J. Organomet. Chem.* **2023**, *992*, 122696. (b) Padilha, N. B.; Penteado, F.; Salomão, M. C.; Lopes, E. F.; Bettanin, L.; Hartwig, D.; Jacob, R. G.; Lenardão, E. J. *Tetrahedron Lett.* **2019**, *60*, 1587.
- (4) Lenardão, E. J.; Freitag, R. A.; Dabdoub, M. J.; Batista, A. C. F.; Silveira, C. C. *Quim. Nova.* **2003**, *26*, 123.

Luz visível e Trisseleneto de Dinitrila (TSD): Novos horizontes na síntese de selenocianatos orgânicos

Sabrina S. Ferreira (IC),¹ João M. Anghinoni (PG),¹ Filipe Penteado (PQ),^{2,*} e Eder J. Lenardão (PQ)^{1,*}

lenardao@ufpel.edu.br; filipe.penteado@ufsm.br

¹ Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos – CCQFA, Universidade Federal de Pelotas – UFPel, P.O. box 354, CEP 96010-900, Pelotas – RS, Brazil.

² Departamento de Química, Centro de Ciências Naturais e Exatas – CCNE, Universidade Federal de Santa Maria – UFSM, Avenida Roraima, CEP 97105-340, Santa Maria – RS, Brazil.

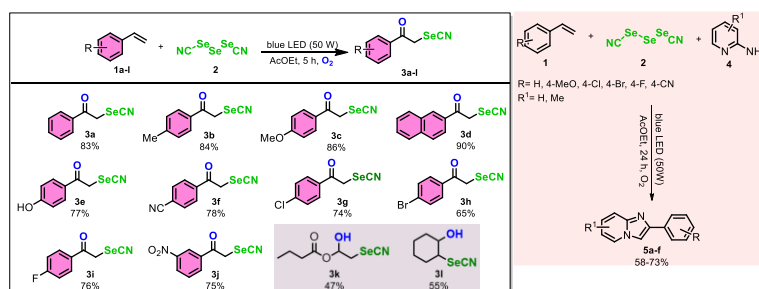
Palavras-Chave: Organosselênio, Luz visível, Imidazopiridinas, Selenocianato, Química Verde.

Introdução

Moléculas contendo selênio têm encontrado aplicações em síntese orgânica e na busca por novos medicamentos.¹ Esforços contínuos têm sido dedicados ao desenvolvimento de métodos novos e eficientes para a incorporação de selênio em moléculas orgânicas.² Nesse contexto, os α -carbonil selenocianatos são uma classe interessante de compostos, que podem ser posteriormente manipulados, incluindo a ciclização para preparar compostos heterocíclicos.³ Imidazo[1,2-*a*]piridinas, por sua vez, são muito estudadas devido às suas atividades farmacológicas.⁴ A maioria dos métodos atualmente utilizados para preparar híbridos de organosselênio e imidazopiridinas utiliza condições rigorosas, como altas temperaturas, uso de bases ou ácidos fortes ou, ainda, metais pesados.

Resultados e discussão

Para contornar essas desvantagens desenvolvemos um acoplamento oxidativo acionado por luz visível entre alquenos **1** e trisseleneto de dinitrila (TSD, **2**). α -Carbonil selenocianatos **3a-j** foram obtidos a partir de derivados de estireno **1a-j** (5 h; rendimento de 65-90%), enquanto α -hidroxi selenocianatos **3k** e **3l** (47% e 55% de rendimento) foram obtidos, respectivamente, a partir do vinil éster **1k** e do ciclo-hexeno **1l**. Nenhuma reação foi observada na ausência de luz. O novo procedimento foi utilizado na síntese *in situ* de 2-arilimidazo[1,2-*a*]piridinas **5a-f** (24 h; rendimento de 58-73%), como uma alternativa ao uso de α -bromocetonas (Esquema 1).



Esquema 1. Síntese de α -carbonil selenocianatos e 2-arilimidazo[1,2-*a*]piridinas.

Conclusões

Em resumo, foi desenvolvido um novo método mais verde para a síntese de α -carbonil selenocianatos e 2-fenilimidazo[1,2-*a*]piridinas. Este método ambientalmente benigno utiliza trisseleneto de dinitrila (TSD) como fonte de selênio e materiais de partida de fácil obtenção.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, FAPERGS e FINEP.

Referências e notas

- 1) Z. Chen, H. Lai, L. Hou, T. Chen, *Chem. Commun.*, 2020, **56**, 179.
- 2) A. D. Sonawane, M. Koketsu, *Curr. Org. Chem.*, 2019, **23**, 3206.
- 3) M. Besev, L. Engman, *Org. Lett.*, 2000, **2**, 1589.
- 4) B. M. Vieira, N. B. Padilha, N. M. Nascimento, G. Perin, D. Alves, R. F. Schumacher, E. J. Lenardão, *Arkivoc.* 2019, **2019**, 6.

Similaridade (Supra)Molecular de Diamidas Substituídas e dos Respective [2]Rotaxanos: Consequências no Processo De Cristalização

Amanda Moura Kieling¹ (IC) Fellipe Freire Santos Farias¹ (PG); Gustavo Henrique Weimer¹ (PG); Suzan Kamine Kunz¹ (IC); Marcos Antonio Pinto Martins^{1,*} (PQ).

*E-mail: marcos.nuquimhe@gmail.com

¹Núcleo de Química de Heterociclos (NUQUIMHE), Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), 97105-900 Santa Maria, RS, Brasil.

Palavras Chave: Similaridade Molecular; Similaridade Supramolecular; [2]Rotaxanos; Interações Intermoleculares.

Introdução

A similaridade cristalina, molecular e supramolecular, tem grande importância no estudo da modulação de propriedades físico-químicas das moléculas. No ramo da Engenharia de Cristais, a similaridade, dentre suas aplicações, pode ser empregada para compreender como interações intermoleculares podem afetar o empacotamento cristalino, e consequentemente, o processo de cristalização. Para este estudo foi utilizado duas diamidas (1 e 2), aplicadas como eixos moleculares, contendo os espaçadores, fumaramida (1) e succinamida (2), além disso, com o mesmo grupo volumoso, *N*-benzilbutan-1-amina. Também, foram utilizados seus respectivos [2]rotaxanos (3 e 4) contendo o macrociclo de tetralactama.

Resultados e discussão

Inicialmente, investigamos a similaridade molecular dos dois eixos moleculares resultando em um *Root Mean Square* (RMS) de 0,0829. Todos os átomos foram considerados para a sobreposição, exceto os hidrogênios. Através da sobreposição supramolecular, empregando a ferramenta de demarcação, cluster supramolecular, percebemos uma diferença considerável na similaridade. Proveniente da diamida distinta nos eixos. Na Figura 1, temos os dois eixos e os clusters supramoleculares, em azul, fumaramida e em rosa, succinamida.

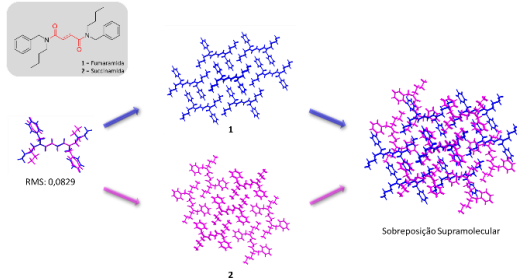


Figura 1. Similaridade (supra)molecular dos eixos moleculares, 1 e 2.

Quando avaliamos os [2]rotaxanos oriundos dos eixos moleculares, é obtido um RMS de 0,0905. Ou seja, maior que o dos eixos moleculares. Porém, quando analisado a sobreposição dos clusters supramoleculares é perceptível uma maior similaridade (Figura 2, fumaramida (azul) e succinamida (rosa)). Isto ocorre devido a interferência do macrociclo atenuando as interações intermoleculares.

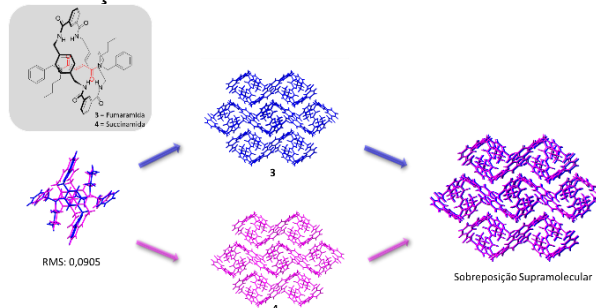


Figura 2. Similaridade (supra)molecular dos [2]rotaxanos, 3 e 4.

Conclusões

A mudança da ligação, dupla ou simples, promoveu diferenças nas interações intermoleculares formadas pelos eixos moleculares, refletindo na organização supramolecular. Para os [2]rotaxanos, o macrociclo molecular influencia, fazendo com que as interações intermoleculares sejam mais similares mesmo com a diferença molecular, RMS, maior.

Agradecimentos

FAPERGS, CNPq e Capes.

Referências e notas

- (1) *J. Mol. Liq.* **2023**, 385 (May), 122291.
- (2) *ACS Omega* **2018**, 3 (3), 2569-2578.

Efeito provocado pelo solvente no perfil de deslocamento químico do núcleo de ^{77}Se nas análises de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de diferentes disselenetos de difenila

Lucas Emanuel Beluzzo Iarocz (IC)^{1*}, Ricardo Hellwig Bartz (PG)¹, Paola dos Santos Hellwig (PG)¹, Gelson Perin (PQ)¹, Andrea Madabeni (PG)², Laura Orian (PQ)² e Márcio Santos da Silva (PQ)¹

*lucasiarocz@gmail.com; silva.ms@ufpel.edu.br

¹Laboratório de Síntese Orgânica Limpa (LASOL), Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos (CCQFA), Universidade Federal de Pelotas (UFPel), Pelotas (RS), Brasil.

²Theoretical Chemistry Group (TCG), Dipartimento di Scienze Chimiche (DiSC), Università degli Studi di Padova (UNIPD), Padova, Italy.

Disselenetos, RMN, Selênio, Solventes.

Introdução

As espectroscopias de RMN de ^{77}Se e ^{125}Te são técnicas analíticas experimentalmente valiosas, uma vez que permitem obter informações relacionadas à estabilidade,^{1a} reatividade,^{1b} e quiralidade,^{1c} bem como possibilitam investigar mecanismos reacionais² de compostos que contêm selênio e/ou telúrio.

O disseleneto de difenila tem sido empregado como padrão referencial interno em razão da sua estabilidade e da facilidade de manuseio,^{3a,b} porém os estudos sobre o efeito das condições experimentais no deslocamento químico nas análises de RMN de ^{77}Se são escassos.

Nesse sentido, este trabalho visa avaliar o efeito da natureza do solvente no deslocamento químico de diferentes disselenetos de difenila, com o intuito de obter valores precisos que serão úteis para fins referenciais em análises de RMN, como também na compreensão da extensão da influência dos solventes deuterados nas variações de deslocamentos químicos (Figura 1).

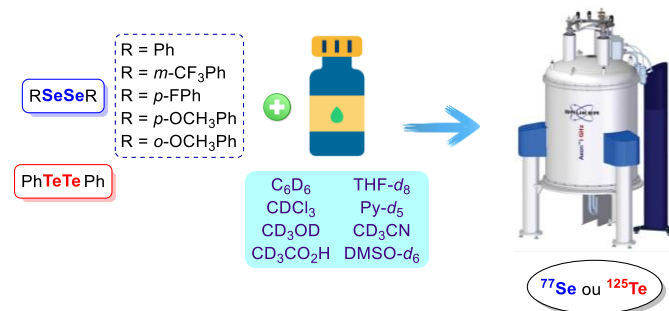


Figura 1. Resumo esquemático do trabalho.

Resultados e discussão

Os disselenetos de difenila foram solubilizados em oito solventes deuterados com polaridades distintas, o que permitiu obter e comparar o perfil de deslocamento químico no RMN de ^{77}Se . De modo geral, os solventes

mais polares, como o metanol (CD_3OD) e o dimetilsulfóxido ($\text{DMSO}-d_6$) deuterados, blindam o núcleo de ^{77}Se de forma mais pronunciada, embora a blindagem da piridina deuterada ($\text{Pi}-d_5$) seja pouco significativa.

O ditelureto de difenila teve o seu perfil de deslocamento químico avaliado por meio do RMN de ^{125}Te com uma finalidade comparativa no que diz respeito às mudanças espectrais. A influência da concentração e da temperatura também foram avaliadas, porém não promoveram nenhuma alteração espectral relevante.

Conclusões

Por fim, é possível afirmar que os dados discutidos neste trabalho permitirão o uso mais preciso das técnicas analíticas de RMN de ^{77}Se e ^{125}Te para fins referenciais em estudos de estabilidade, reatividade e quiralidade, como também na elucidação e compreensão de mecanismos de reações orgânicas.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPERGS, FINEP, UNIPD e UFPel.

Referências e Notas

- (1) (a) Piovan, L.; Milani, P.; Silva, M. S.; Moraes, P. G.; Demasi, M.; Andrade, L. H. *Eur. J. Med. Chem.* **2014**, *73*, 280. (b) Silva, M. S.; Andrade, L. H. *Org. Biomol. Chem.* **2015**, *13*, 5924. (c) Silva, M. S.; Pietrobom, D. *New J. Chem.* **2015**, *39*, 8240.
- (2) Ribaud, G.; Bellanda, M.; Menegazzo, I.; Wolters, L. P.; Bortoli, M.; Sueta-Ferrer, G.; Zagotto, G.; Orian, L. *Chem. Eur. J.* **2017**, *23*, 2405.
- (3) (a) Silva, M. S.; Alves, D.; Hartwig, D.; Jacob, R. G.; Perin, G.; Lenardão, E. J. *Asian J. Org. Chem.* **2021**, *10*, 91. (b) Kumar, M.; Singh, V. P. *New J. Chem.* **2022**, *46*, 12010.

Material Polimérico Nanoestruturado para liberação pH-responsiva da Curcumina

Ana Carolina Domingues Fidalgo (PG)* e Adriana Passarella Gerola (PQ)

domingues.ana@posgrad.ufsc.br

Laboratório de Catálise e Fenômenos Interfaciais, Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC).

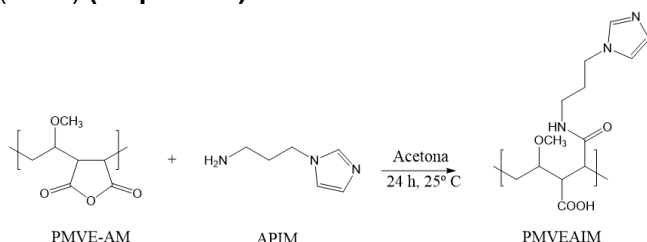
Palavras Chave: Curcumina, Polímeros funcionalizados, Nanomateriais, Sistemas de liberação sustentada, Materiais inteligentes.

Introdução

A curcumina apresenta importantes propriedades anti-inflamatórias e anticancerígenas.¹ No entanto, sua aplicação terapêutica é limitada devido à sua baixa solubilidade e baixa estabilidade em meio aquoso.² A encapsulação de fármacos hidrofóbicos em sistemas transportadores é uma estratégia favorável para aumentar a absorção e a biodisponibilidade desses compostos no organismo.³ O desenvolvimento de sistemas nanoparticulados poliméricos funcionalizados com grupos imidazol permite a obtenção de materiais inteligentes pH-responsivos, de forma que a entrega do agente ativo é direcionada para tecidos específicos do corpo e a liberação ocorra a partir de mudanças de pH do meio.⁴

Resultados e discussão

O material inteligente pH-responsivo (PMVEAIM) foi desenvolvido a partir da funcionalização do polímero comercial poli(metil vinil éter -alt- anidrido maleico) (PMVE-AM) com grupos 1-(3-aminopropil)-imidazol (APIM) (**Esquema 1**).



Esquema 1. Funcionalização do PMVE-AM com APIM para a obtenção do PMVEAIM.

As nanopartículas poliméricas foram obtidas por adição gota-a-gota da solução polimérica em solução contendo surfactante catiônico (CTAB) e curcumina. A taxa de incorporação de curcumina nos complexos nanoestruturados (PMVEAIM/CTAB) foi de 34,5%. As partículas apresentaram tamanho hidrodinâmico médio de 200 nm em pH 7 e 100 nm em pH 3. A curcumina encapsulada apresentou baixa taxa de degradação e

maior estabilidade em ambientes ácidos. Os ensaios de liberação indicaram liberação máxima de 27% em pH 3 e de 70% em pH 7, evidenciando um sistema de liberação pH-responsivo para a curcumina.

Tabela 1. Valores das constantes de velocidade de liberação (k), tempo de meia-vida ($t_{1/2}$) e porcentagem de liberação em pH 3 e 7.

		k (h^{-1})	$t_{1/2}$ (h)	%lib
pH 3	k_1	0,20±0,02	3,5	25%
	k_2	-	-	-
pH 7	k_1	1,82±0,20	0,38	23%
	k_2	0,19±0,08	3,6	46%

Conclusões

A encapsulação da curcumina nos dispositivos nanoestruturados desenvolvidos permitiu a maior liberação em pH 7, e estabilização em meio aquoso, principalmente em meio ácido. Diante disso, o sistema de liberação desenvolvido pode constituir uma nova alternativa para o tratamento de cânceres na região do cólon com administração via oral.

Agradecimentos

À Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC) e aos órgãos de fomento, INCT-Catálise, FAPESC, CNPq e CAPES.

Referências e notas

- (a) Kant, V. *et al. Int. Immunopharmacol.* **2014**, 20, 322.
(b) Li, Y. e Zhang, T. *Cancer Lett.* **2014**, 346, 197.
- Panda, A. K. *et al. J. Exp. Pharmacol.* **2017**, 9, 31.
- (a) Naksuriya, O. *et al. Biomaterials.* **2014**, 35, 3365.
(b) Nagahama, K. *et al. Sci. Rep.* **2016**, 6, 30962.
- Han, S. M. *et al. Macromol. Res.* **2022**, 30, 547

Extração, caracterização química e atividade antifúngica do óleo essencial de folhas da espécie *Acca sellowiana* (O. Berg) Burret

Renata Salamoni^{1*} (PG), Iêda Maria Begnini¹ (PQ), Ricardo Andrade Rebelo¹ (PQ)

rsalamoni@furb.br

¹ Departamento de Química, Universidade Regional de Blumenau - FURB, Blumenau – SC, 89030-903

Palavras Chave: Óleo essencial, Antifúngico, Caracterização química, Hidrodestilação, Feijoa.

Introdução

Os óleos essenciais (OE), também conhecidos como óleos voláteis, são utilizados desde a antiguidade, especialmente devido às suas propriedades aromáticas e terapêuticas, como por exemplo, antibacteriana, anti-inflamatória e antifúngica⁽¹⁾. O Brasil é um país que se destaca por sua extensa biodiversidade, com uma rica fauna e flora⁽²⁾. A espécie *Acca sellowiana* pertence à família *Myrtaceae* e é encontrada no planalto meridional do Brasil e no nordeste uruguaio⁽³⁾. Conhecida como goiaba serrana, apesar de ser nativa de regiões brasileiras, é pouco difundida e seu fruto é pouco conhecido pela população. Por isso, pesquisas sobre esta espécie são de grande importância, na busca de novas tecnologias e alternativas terapêuticas.

Neste trabalho foi feita a extração do óleo essencial de folhas de *Acca selowinana*, sua caracterização química e avaliação da atividade antifúngica *in vitro*.

Resultados e discussão

As folhas foram coletadas na cidade de Macieira/SC, sendo hidrodestiladas com aparelho Clevenger modificado, durante 4 horas, para a obtenção do óleo essencial, com um rendimento de 0,27% (m/m). Através da análise cromatográfica (GC-FID e GC-MS) foi possível caracterizar 91,2% dos constituintes do óleo essencial, onde os majoritários encontrados foram o espatulenol (11,0%), biciclogermacreno (10,6%), linalool (8,8%), globulol (8,8%), β-cariofileno (5,6%) e β-felandreno (5,0%). O OE apresentou 6,6% de monoterpenos, 12,6% de monoterpenos oxigenados, 30,8% de sesquiterpenos, 37,8% de sesquiterpenos oxigenados e 3,4% de outros. Análise complementar por RMN de ¹H e ¹³C será conduzida para confirmar a presença dos álcoois majoritários espatulenol, globulol e linalool, pois estes apresentarão sinais característicos de ¹³C na região acima de 60 ppm, diferentemente dos demais hidrocarbonetos terpênicos. Adicionalmente não teremos a presença de hidrogênios na região de 4 ppm, por serem álcoois terciários. A técnica DEPT-135 confirmará a presença dos poucos carbonos “quaternários” ligados à hidroxila.

Após a caracterização química, a atividade antifúngica do óleo foi testada utilizando a diretriz da CLSI M-38 por microdiluição em caldo em placa de 96 poços⁽⁴⁾. Foi observada atividade antifúngica moderada frente ao fungo *Candida glabrata*, fraca frente às espécies *C. kusei* e *C. tropicalis*, e ausência de atividade para *C. albicans*. Os resultados foram expressos em Concentração Inibitória Mínima (CIM, **Tabela 1**).

Tabela 1. Atividade antifúngica do óleo essencial das folhas de *Acca sellowiana*.

Espécie de <i>Candida</i>	CIM (ug mL ⁻¹)
<i>Candida albicans</i>	>1000
<i>Candida krusei</i>	500
<i>Candida tropicalis</i>	1000
<i>Candida glabrata</i>	250

Conclusões

No presente estudo, o OE de folhas de *Acca selowiana* foi caracterizado com predominância de sesquiterpenos. Além de apresentar atividade antifúngica moderada frente a *Candida glabrata*. Acredita-se que os resultados aqui apresentados agregam conhecimento químico e biológico sobre o óleo essencial de *A. sellowiana*, sendo importante para o direcionamento de pesquisas futuras sobre a flora nativa regional.

Agradecimentos



Ao Departamento de Ciências Farmacêuticas da FURB, pelo auxílio na realização do ensaio antifúngico.

Referências e notas

- (1) HOLETZ, F. B.; PESSINI, G. L.; SANCHES, N. R.; *et al.* Mem. Inst. Oswaldo Cruz, **2002**, 9, 7, p. 1027-1031.
- (2) MINISTÉRIO DO MEIO AMBIENTE. On-line, **s.d.**
- (3) AMARANTE, C. V. T.; SANTOS, K. L. Revista Brasileira de Fruticultura, **2011**, 33,1.
- (4) CLSI. *Clin. & Lab. Standards Institute*, **2017**, 3, 1-49.

Síntese e Caracterização de Fluoróforos Heteroarilpropanohidrazonas Derivadas do Ácido Levulínico

Adriana M. Neves*¹ (PQ), Juliana L. Malavolta¹ (PQ), Guilherme C. Asoo¹ (IC), José Eduardo A. Toledo¹ (IC), Taís B. Goulart¹ (FM), Fernanda Ludwig¹ (PG), Daniele Müller¹ (PG), Alex F. C. Flores¹ (PQ).

¹Escola de Química e Alimentos - Universidade Federal do Rio Grande - FURG - Avenida Itália, km 08 - CEP: 96.203-900 Rio Grande - RS - Brasil. *E-mail: adrianamdasneves@gmail.com

Palavras Chave: Fluorescência, Trifluorometilpirimidinas, Pirazolo[1,5-a]pirimidinas, Hidrazonas, Ácido levulínico,

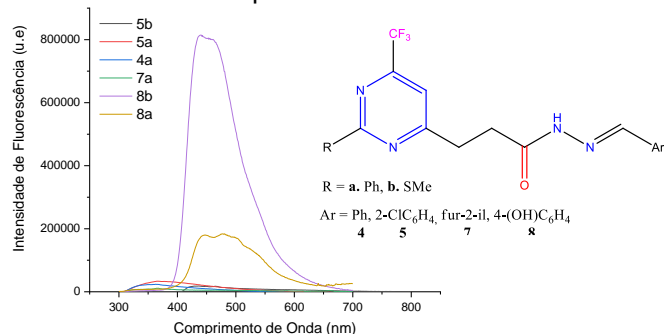
Introdução

A fluorescência é um tipo de fotoluminescência envolvendo a liberação de fótons a partir de um estado excitado obtido por excitação luminosa.¹ O avanço nas pesquisas no desenvolvimento de moléculas heterocíclicas se justifica por ser uma estratégia eficiente na busca de novos fluoróforos. Moléculas contendo pirimidinas, pirazolopirimidinas e hidrazonas vêm sendo estudadas quanto as atividades ópticas, em processos fotoquímicos envolvendo fenômenos luminescentes.² Desse modo, o trabalho tem por objetivo o estudo das propriedades fluorescentes de hidrazonas derivadas de heteroarilpropanoatos, contendo pirimidinas ou pirazolo[1,5-a]pirimidinas.

Resultados e discussão

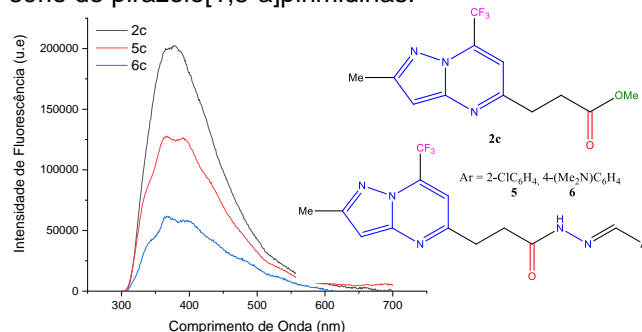
Os fluoróforos foram sintetizados a partir do precursor de 7,7,7-trifluor-4-metoxi-6-oxo-4-heptenoato de metila 1, derivado do ácido levulínico.³ Todos os compostos foram caracterizados por RMN ¹H e ¹³C. Os produtos heteroarilpropanohidrazonas (**2c**, **4a**, **5a-c**, **6c**, **7a**, **8a-b**) foram analisados quanto à emissão de fluorescência para sólidos cuja excitação ocorreu na região de 300-400nm (filtro-L42). A pirimidina **8b** exibiu maior intensidade de emissão de fluorescência no comprimento de onda de 440 nm (Figura 1). Esse heterociclo contém um grupo doador de elétrons R=SCH₃ na pirimidina e na parte da aromática da hidrazona Ar=4-(OH)C₆H₄, o que pode ser um fator relevante para o resultado.

Figura 1: Gráfico com as emissões de fluorescência da série de trifluorometilpirimidinas.



As pirazolo[1,5-a]pirimidinas apresentaram intensidade de fluorescência, porém foi menor com relação ao precursor do composto **2c**, com substituinte metoxi ao invés da hidrazona substituída (Figura 2).

Figura 2: Gráfico com as emissões de fluorescência da série de pirazolo[1,5-a]pirimidinas.



Conclusões

Todas as heteroarilpropanohidrazonas apresentaram propriedades fluorescente, em destaque a pirimidina **8b** e da pirazolo[1,5-a]pirimidinas **2c**. O composto **8b** destacou-se por ser o fluoróforo com maior rendimento quântico em comprimento de onda máximo de 440nm e alta intensidade de emissão de fluorescência.

Agradecimentos

Órgão de Fomento: CNPQ - Processo: 150545/2022-3, CIA-Central de Análises.

Referências e notas

- (1) (a) Shukla, U.; Bari, S. *J. Pure Appl. & Ind. Phys.* **2018**, *8*(5), 25. (b) Mako, T. L.; Racicot, J. M.; Levine, M. *Chem. Rev.* **2019**, *119*(1), 322.
- (2) (a) Tigreros, A.; Aranzazu, S. L.; Bravo, N. F.; Rivera, J. Z.; Portilla, J. *RSC Adv.*, **2020**, *10*, 39542. (b) Achelle, S.; Bodiou, L.; Charrier, J.; Guen, R. F. *Comptes Rendus Chimie*, **2016**, *19*(3), 279-285. (c) Delevati, M. A. *Dissertação de Mestrado - FURG*, **2020**. (d) Golçalves H. A.; Tese de Doutorado - FURG, **2021**.
- (3) Malavolta, J. L. *Tese de Doutorado - UFSM*, **2014**.

SÍNTESE FOTOCATALÍTICA DE 3-SELANILINDÓIS SOB IRRADIAÇÃO DE LUZ VISÍVEL UTILIZANDO ÁCIDO ARILSELENÍNICO COMO AGENTE SELENILANTES

Gabriela T. de Quadros (IC),^{1*} Carolina A. de Oliveira (IC),¹ Savana P. de Medeiros (IC),¹ Laura Abenante (PG),² Eder J. Lenardão (PQ)¹

*gabrielatrichdequadros@gmail.com

¹Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos (CCQFA), Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, RS, Brasil

²Área do Conhecimento de Ciências Exatas e Engenharias, Universidade de Caxias do Sul, Caxias do Sul, RS, Brasil

Palavras-Chave: Selanilindóis, Fotocatálise, Química verde.

Introdução

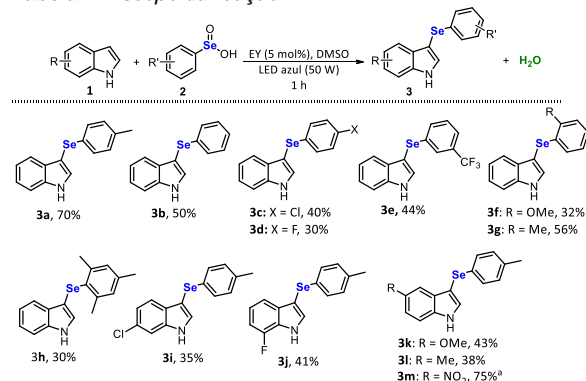
O núcleo indol é parte importante de muitos medicamentos, possuindo diversas propriedades, como anti-inflamatória e anticefaleia.¹ Além disso, moléculas que possuem o núcleo indol funcionalizado com selênio também apresentam atividades biológicas, como antidepressiva e anticancerígena.²

Baseado na relevância dos selanilindóis desenvolveu-se a síntese de diferentes 3-selanilindóis partindo de indóis substituídos e ácidos arilselenínicos através da fotocatalise.

Resultados e discussão

Após o estudo de otimização, a melhor condição reacional foi encontrada quando se utilizou eosina Y (EY, 5 mol%) como fotocatalisador, DMSO como solvente, sob irradiação com LED azul (50 W) por 1 hora sob atmosfera aberta. Sob estas condições, foram sintetizados diferentes 3-selanilindóis **3**, variando os substituintes do indol **1** e do ácido arilselenínico **2** (Tabela 1).

Tabela 1. Escopo da reação



^a Após 3 h de reação, 75% de conversão. Determinado por CG-EM.

Um total de treze exemplos foram sintetizados, 3 deles inéditos até o momento. Doze deles foram caracterizados por RMN de ¹³C, ¹H e ⁷⁷Se e todos foram caracterizados por CG-EM.

Conclusões

Neste procedimento, ácidos arilselenínicos, facilmente preparados a partir dos correspondentes disselenetos de diarila, foram utilizados como fonte eletrofílica de selênio na substituição eletrofílica aromática com diferentes indóis. Os únicos subprodutos da reação são H₂O e disseleneto de diarila, o qual pode ser recuperado e reutilizado.

Agradecimentos

Os autores agradecem aos órgãos de fomento, CNPq, CAPES e FAPERGS.

Referências e notas

- a) Bartoli, G., Bencivenni, G., Dalpozzo, R. *Chem. Soc. Rev.* **2010**, 39, 4449-4465. b) Krüger, K., Tillack, A., Beller M. *Adv. Synth. Catal.* **2008**, 350, 2153-2167.
- a) Casaril, A. M., Domingues, M., Fronza, M., Vieira, B., Beghini, K., Lenardão, E. J., Seixas, F. K., Collares, T., Nogueira, C. W., Savegnago, L. J. *Psychopharmacol.* **2017**, 31, 1263-1273. b) Zhiyong, W., Li, X., Zuo, Daiying, Lang, B., Wu, Y., Jiang, M., Ma, H., Bao, K., Wu, Y., Zhang, W. *Sci. Rep.* **2016**, 6, 23986, 2016.

EXTRATO BRUTO DAS CASCAS DAS RAÍZES DE *Maytenus ilicifolia*: COMPARAÇÃO DE TÉCNICAS DE EXTRAÇÃO E ANÁLISE FITOQUÍMICA PRELIMINAR

Luísa Helena Alves Paz¹ (PG)*, Débora Fioravante da Silveira¹ (IC), Ionara Irion Dalcol¹ (PQ), Ademir Farias Morel¹ (PQ)

luisahelenaalvespaz@gmail.com

¹ Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria

Palavras Chave: *Espinheira-santa*, Extração, Fitoquímica

Introdução

A família Celastraceae compreende espécies que apresentam uma grande variedade de atividades biológicas, assim como a presença de diversos metabólitos secundários. Dentre as espécies da família, destaca-se a *Maytenus ilicifolia* (Mart. ex Reissek), do gênero *Maytenus*, conhecida popularmente como “espinheira-santa”. Nativa da região sul do Brasil, a planta é utilizada na medicina popular no tratamento de doenças gastrointestinais (MEIRELLES *et al*, 2022). Este trabalho teve como objetivos: a obtenção do extrato bruto metanólico das cascas das raízes de *Maytenus ilicifolia*, utilizando três diferentes métodos de extração; o fracionamento do extrato bruto de maior rendimento e a análise fitoquímica dos extratos brutos e das frações obtidas.

Resultados e discussão

Após a coleta do material vegetal, as cascas foram separadas das raízes e secas em estufa de ar circulante, a 40°C, por 7 dias. Na sequência, as cascas secas foram moídas em um moinho de facas.

Para a obtenção do extrato bruto metanólico empregou-se três metodologias: extração por maceração à frio, extração assistida por ultrassom e extração em aparelho de Soxhlet. A maceração à frio foi realizada durante 6 dias, com troca de solvente diária. Para extração assistida por ultrassom foram realizados quatro ciclos de 60 minutos. Na extração, à quente, utilizando o aparelho de Soxhlet, o material vegetal foi mantido em metanol, sob refluxo, durante 7 horas. Todas as extrações foram realizadas em triplicata.

O rendimento de cada extração foi de: 20,70% ($\pm 1,76$) para o extrato bruto obtido por maceração (EBM); 20,95% ($\pm 0,94$) para o extrato bruto obtido por ultrassom (EBU) e 28,59% ($\pm 1,56$) para o extrato bruto obtido com aparelho Soxhlet (EBS).

Por apresentar melhor rendimento, o extrato EBS foi escolhido para realização do fracionamento por ordem crescente de polaridade, obtendo as seguintes frações: Fração Hexano (F. Hex), Fração Clorofórmio (F. CHCl₃), Fração Acetato de Etila (F. AcOEt) e Fração n-Butanol (F. BuOH).

O ensaio fitoquímico foi realizado com os extratos EBM, EBU e EBS e também com as frações F. Hex, F. CHCl₃, F. AcOEt e F. BuOH, utilizando os testes padrão de identificação, descritos por Simões *et al*, 2019. Os testes indicaram a presença de flavonóides, terpenóides, taninos, antraquinonas e alcaloides nos extratos e nas frações. Além disso, a presença de saponinas no EBS, EBM, F. CHCl₃, F. AcOEt e F. BuOH e a presença de cumarinas no EBS, F. Hex e F. CHCl₃.

Conclusões

A partir dos dados apresentados, conclui-se que o melhor método de obtenção do extrato bruto das cascas das raízes de *Maytenus ilicifolia* foi a extração utilizando o aparelho de Soxhlet. Nota-se que a técnica empregada teve influência também na extração de metabólitos secundários. Portanto, o método será empregado novamente em maior escala, a fim da obtenção e identificação dos metabólitos indicados na análise fitoquímica preliminar.

Agradecimentos

Ao Núcleo de Pesquisa de Produtos Naturais, à CAPES, ao Programa de Pós Graduação em Química e à Universidade Federal de Santa Maria.

Referencias e notas

- (1) MEIRELLES, G. *et al*. Phytochemistry and Pharmaceutical Technology Studies on *Monteverdia ilicifolia* (*Maytenus ilicifolia*): a Traditionally Used Medicinal Plant. *Revista Brasileira de Farmacognosia*, v. 32, p. 859-870, 2022.
- (2) SIMÕES, C. M. O. *et al*. FARMACOGNOSIA: do produto ao medicamento. Porto Alegre: Artmed, 2019.

INFLUÊNCIA DE COMPOSTOS ORGANOSELENIO NA MOBILIDADE DE MEMBRANAS LIPÍDICAS

Eduardo Borges Velho da Silva¹(IC), Desirée dos Santos Magalhães Costa¹(PG), Tiago E.A Frizon²(PQ), Vânia Rodrigues de Lima¹(PQ). eduardobvelhi@gmail.com

¹Escola de Química e Alimentos, Programa de Pós- Graduação em Química Tecnológica e Ambiental, Universidade Federal do Rio Grande.
²Departamento de energia e sustentabilidade, Universidade Federal De Santa Catarina, Araranguá, Santa Catarina.

Palavras-Chave: Organoselênio, Lipossomos, Espectroscopia.

Introdução

Estudar as interações moleculares é importante para o desenvolvimento de novos fármacos assim como para a definição de suas respostas em sistemas biológicos [1]. No contexto dos compostos de organoselênio, está estabelecido que estes têm efeitos antivirais e antitumorais, associados diretamente a suas propriedades antioxidantes. [2]. Por sua vez, a atividade antioxidante tem dependência direta com interações moleculares entre membranas celulares e espécies reativas [3]. Neste trabalho, foram analisados quatro compostos de organoselênio contendo um anel indólico (3a-3d), no que tange seus efeitos nos parâmetros espectroscópicos e termodinâmicos de um modelo de membrana lipossomal composto por asolecitina de soja (ASO).

Resultados e discussão

As variações induzidas pelos compostos 3a-3d nos parâmetros dos picos de FTIR estão mostrados na Figura 1.

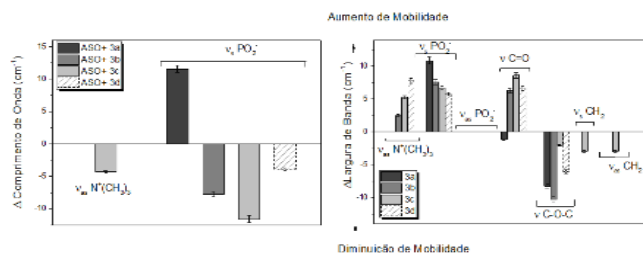


Figura 1 – Variação na largura de banda e no número de onda dos picos de estiramento dos grupos lipídicos, provocados pelos compostos organoselênio.

As variações dos compostos 3a-3d nos parâmetros de DSC estão mostrados na Tabela 1.

Tabela 1- Variações (Δ) pelos compostos 3a-3d na temperatura de transição de fase (T_m) e variação de entalpia (ΔH) de ASO.

	ASO	$\Delta 3a$	$\Delta 3b$	$\Delta 3c$	$\Delta 3d$
T_m (° C)	-25.30	0.04	5.12	3.63	2.08
ΔH (J/g)	-1.21	1.13	1.2	1.2	1.17

Os dados de FTIR demonstraram que 3a aumentou a mobilidade da região polar lipídica. Já o composto 3c parece estar localizado na interface lipídica. Os resultados de DSC expressam que compostos 3b e 3d ordenam a parte hidrofóbica de ASO.

Conclusões

Diferentes tipos de atuação antioxidante são esperados para os compostos em função de sua localização e influencia em cada região lipídica.

Agradecimentos

CNPQ, FURG.

Referencias e notas

- (1) NOGUEIRA Alessandro, DE SOUZA Robson, PEREIRA Luiza, MALLMANN CHRISTIAN, FERREIRA Ailton, CLEMENTIN Rosilene, DE LIMA Vânia. Physicochemical interactions among α -eleostearic acid-loaded liposomes applied to the development of drug delivery systems. **Journal of Molecular Structure**, 1154, 248-255, 2018.
- (2) RAFIQUE Jamal, FARIAS Gilliandro, SABA Sumbal, ZAPP Eduardo, Belletini Ismael, SALLA Cristian, BECHTOLD Ivan, SHNEIDE Marcos, NETO José, DE SOUZA David, BRAGA Hugo, RIBEIRO Luiz, GASTALDON Francine, PICH Claus, FRIZON Tiago. Selenylated-oxadiazoles as promising DNA intercalators: Synthesis, electronic structure, DNA interaction and cleavage. **Dyes and Pigments**, 180, 2020.
- (3) NOGUEIRA Alessandro, KOKUSZI Lucas, CORDEIRO Arthur, SALGADO Henrique, COSTA Jorge, SANTOS Lucielen, DE LIMA Vânia. Spirulina sp. LEB 18-extracte

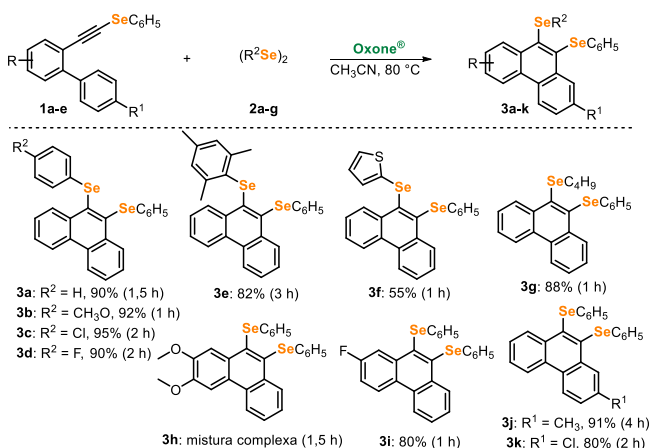
Síntese de 9,10-bis(organosselanil)fenantrenos promovida por Oxone®

Jonatan dos Santos Guedes^{1,*} (IC), Paola dos Santos Hellwig¹ (PG), Helen Afonso Goulart¹ (PG), Emily Gonçalves Jorge¹ (IC), Angelita M. Barcellos² (PQ), Gelson Perin¹ (PQ). * vargsjon@gmail.com¹ Laboratório de Síntese Orgânica Limpa – LASOL, CCQFA, Universidade Federal de Pelotas, UFPel, 96010-900, Pelotas, RS, Brasil.² Escola de Química e Alimentos – EQA, Fundação Universidade Federal do Rio Grande, FURG, 96203900, Rio Grande, RS, Brasil.

Palavras-Chave: Ciclização, Organosselênio, Fenantrenos

Introdução

Os fenantrenos são hidrocarbonetos policíclicos aromáticos encontrados em compostos de ocorrência natural e apresentam importantes aplicações farmacológicas.¹ Adicionalmente, o preparo dos compostos organosselênio é de grande interesse, uma vez que estes podem ser utilizados como intermediários sintéticos e catalisadores na formação de novas ligações C-C, além de serem relevantes farmacologicamente.² Assim, o presente trabalho tem por objetivo realizar a ciclização intramolecular de organosselênio(bifenil-2-alquinos) **1** utilizando espécies radicalares de selênio, gerados *in situ* pela reação entre disselenetos de diorganoíla **2** e o Oxone®, para a síntese de 9,10-bis(organosselanil)fenantrenos **3** (Figura 1).

Figura 1. Síntese dos 9,10-bis(organosselanil)fenantrenos **3**.

Resultados e discussão

Os 9,10-bis(organocalcogenil)fenantrenos **3** foram preparados usando como substratos os organosselanil(bifenil-2-alquinos) **1** substituídos nas posições R e R¹ com grupos doadores (R = 4,5-(CH₃)₂ e R¹ = 4-CH₃) e retiradores de elétrons (R = 4-F e R¹ = 4-Cl) e disselenetos de diorganoíla **2**, substituídos com grupos doadores e retiradores de elétrons, além de um substituinte heteroaromático e alquílico, na presença do oxidante verde, o Oxone®. As reações foram conduzidas em acetonitrila (2,0 mL) como solvente sob agitação magnética em sistema convencional de aquecimento à 80 °C (banho de óleo) em frasco aberto.

O método desenvolvido se mostrou operacionalmente simples e eficaz produzindo os selanilfenantrenos **3** com rendimentos moderados a excelentes após 1-4 h de reação (Figura 1). Contudo, o composto **3j** não pode ser obtido devido a formação de uma mistura complexa de produtos de selenilação no anel dissustituído do selenoalquino **1b** (Figura 1).

Conclusões

Em resumo, foi desenvolvido um método simples e livre de metais de transição para a síntese de 10 exemplos de 9,10-bis(organosselanil)fenantrenos inéditos na literatura, obtidos em 55-95% de rendimento após curtos tempos reacionais (1-4 h) através da carbociclização de selenoalquinos promovida por Oxone®/disselenetos de diorganoíla.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPERGS e FINEP pelo apoio financeiro.

Referências e notas

- (1) (a) Li, J.; Wentao Feng, W.; Dai, R.; Li, B. *Pharmacol. Res. - Mod. Chin. Med.* **2022**, *3*, 100078. (b) Jhingran, S.; Laxmikeshav, K.; Mone, S.; Rao, V. K.; Shankaraiah, N. *Curr. Med. Chem.* **2022**, *29*, 3530.
- (2) Lenardão, E. J.; Santi, C.; Perin, G.; Alves, D. *Organochalcogen Compounds Synthesis, Catalysis and New Protocols with Greener Perspectives*. 1. ed.: Elsevier, Amsterdam, 2022.

Tingimento de tecidos com pigmento fluorescente sintetizado com diferentes catalisadores e sua caracterização

^{1,2}Nicolas M. M. Barreto (IC), ¹Gustavo H. Morelli (IC), ²Vanessa A. Matias (TC), ^{1,2}Albertina X. da R. Correia (PQ)
^{*}mennanicolas1504@edu.univali.br

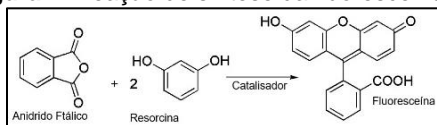
¹Curso de Engenharia Química, Escola Politécnica, UNIVALI; ²LaPeQ – multiusuário, UNIVALI

Palavras Chave: Síntese, fluoresceína, catalisadores, FTIR, UV/Vis, corante

Introdução

A fluoresceína é um composto orgânico, utilizado como corante, sintetizado a partir do resorcinol e do anidrido ftálico (Figura 1). Ela possui diversas aplicações, sendo importante no estudo dos vasos sanguíneos, determinação de antígenos, em análises de cosméticos e fármacos, como também, no processo de tingimento têxtil ⁽¹⁾. Este trabalho teve como objetivos: Avaliar a eficiência de diferentes catalisadores na síntese da fluoresceína e seu tingimento em tecido de algodão e nylon 240.

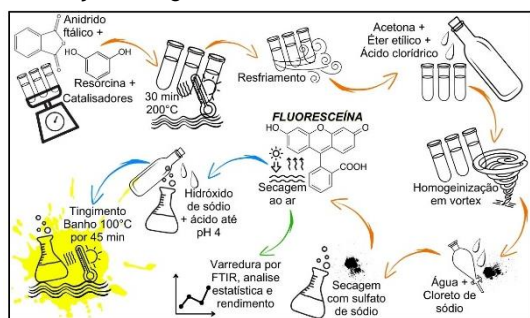
Figura 1. Reação de síntese da fluoresceína ⁽¹⁾.



Resultados e discussão

Para a síntese da fluoresceína foram utilizados os seguintes catalisadores: NaCl, CrCl₃, FeCl₃, HgCl₂, ZnCl₂, ZnSO₄. A metodologia está demonstrada no fluxograma da Figura 2.

Figura 2. Fluxograma de metodologia para síntese, caracterização e tingimento da fluoresceína.



O teste t para uma amostra (valor de teste: 95), mostrou que não há diferença entre a média dos rendimentos e o rendimento de 95% ($t(4) = -1,729$; $p > 0,05$). Observando os casos individualmente, nota-se que os catalisadores ZnCl₂ e NaCl obtiveram rendimentos melhores (Tabela 1). Na figura 3 são apresentados os espectros de FTIR – DRIFT para os catalisadores, com os melhores rendimentos. Foram realizados processos de pigmentação com os seguintes tecidos: Nylon 240 e

algodão, apresentando fluorescência (Figura 4) apenas para o Nylon. O espectro mostra a presença de bandas que coincidem com a fórmula molecular do produto desejado (Figura 3).

Tabela 1. Rendimento em função do catalisador.

Catalisador	Rendimento (g)	Rendimento (%)
NaCl	0,4989	83,15
CrCl ₃	0,0190	3,17
HgCl ₂ ^a	0,7096 ^a	118,27 ^a
FeCl ₃	0,4837	80,62
ZnCl ₂	0,5840	97,33
ZnSO ₄	0,4088	68,13

^aAmostra com rendimento maior que 100%, apontando para a presença de impurezas.

Figura 3. Análise em FTIR da fluoresceína sintetizada NaCl e ZnCl₂, como catalisadores.

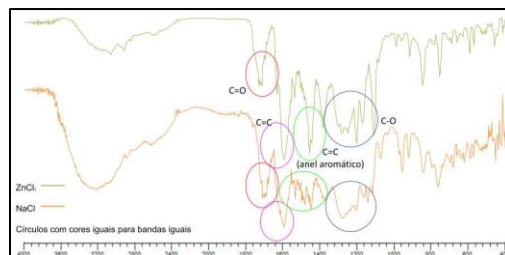


Figura 4. Amostra de tecido de nylon 240 tingido com fluoresceína usando como catalisador ZnCl₂.



Conclusões

- ✓ Melhores catalisadores: ZnCl₂ e NaCl
- ✓ Melhor tecido: Nylon 240

Em trabalhos futuros, a avaliação do valor dos catalisadores e do custo ambiental devem ser levados em consideração.

Referências e notas

- (1) GUPTA, Priya et al. Synthesis of Fluorescein Dye Using Microwave Radiations and its Application on Textile Substrates. *Fibres & Textiles in Eastern Europe*, n. 2 (146, p. 100-105, 2021).

Produção de biodiesel a partir do óleo de babaçu: comparação da obtenção por catálise ácida, básica e enzimática.

Isabella Tanaka Lopes da Silva (IC), Sofia Maniezzi Macre (IC), Luciano Fernandes (PQ) lfernandes@utfpr.edu.br.

Universidade Tecnológica Federal do Paraná – Campus Ponta Grossa – UTFPR - PG

Palavras Chave: Biodiesel, biotransformação, enzima, transesterificação.

Introdução

O aumento no uso de combustíveis fósseis causa um grande impacto no meio ambiente e na vida dos que habitam o planeta Terra. O especialista climático, David Wallace, calcula que em 30 anos, contados desde a década de 90, o homem emitiu na atmosfera 52,74% de todo CO₂ produzido. A liberação desses gases de efeito estufa reduz a velocidade com que os oceanos levam para absorver o calor atmosférico e com isso voltar ao seu estado de equilíbrio (TOKARSKA, et al. 2019). Assim os combustíveis não renováveis colaboram para o desequilíbrio climático do planeta, tornando sua utilização inviável no longo prazo. Como alternativa a tais impactos incentiva-se a utilização dos combustíveis renováveis, dentre os quais encontra-se o etanol e o biodiesel. São chamados de combustíveis renováveis por serem provenientes de fontes consideradas renováveis, como a cana-de-açúcar e óleos vegetais. As plantas que dão origem a estes combustíveis consomem o CO₂ liberado pela combustão dos mesmos, tornando neutro o ciclo do carbono (LIMA, 2022).

Resultados e discussão

Extraíu-se o óleo de 120g de castanhas de babaçu. Este óleo foi submetido ao processo de biotransformação por transesterificação enzimática. Os produtos desta reação foram separados e a parcela lipídica foi analisada.



Figura 1. Produtos da reação de transesterificação do óleo da castanha de babaçu.

Analisou-se a determinação do índice de iodo, a determinação da acidez, a determinação do índice de peróxidos e a prova de Kreiss.

Os resultados obtidos foram comparados com a tabela de padrões de qualidade do biodiesel, obtido pela catálise química ácida e básica, a qual traz os dados do combustível de acordo com as especificações legais da Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Bicombustíveis (ANP) 07/2008.

Tabela 1. Comparação dos padrões de qualidade do biodiesel

Característica	Unidade	Padrão de Qualidade	Análises Realizadas
Índice de iodo	g I ₂ /100g	120 (máx)	3,45
Índice de acidez	mg KOH/g	0,5	0,84
Prova de Kreiss	-	Negativo	Negativo

Conclusões

Com o exposto, pode-se concluir que as propriedades do biodiesel analisadas não estão totalmente de acordo com as especificações da ANP. Em razão disso, recomenda-se o tratamento do biocombustível obtido pela via enzimática antes de sua utilização, a fim de regularizar seu índice de acidez para que fique dentro dos parâmetros recomendados.

Agradecimentos

À Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR).

Referências e notas

- (1) LIMA, Ana Luiza Lorenzen. Combustíveis: são substâncias que liberam energia durante a reação química com um comburente. Disponível em: <https://encurtador.com.br/iuxzUJ>. Acesso em: 8 set. 2023.
- (2) TOKARSKA, Katarzyna B et al. Quantifying human contributions to past and future ocean warming and thermosteric sea level rise. *Environmental Research Letters*, v. 14, n. 7, 12 jul. 2019. Disponível em: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1748-9326/ab23c1>. Acesso em: 8 set. 2023.

Preparo de emulsões do Fluconazol utilizando Líquidos Iônicos Ativos na Superfície (SAILs) como emulsificantes.

Vinicius D. Lacorte (IC)^{1*}, Letícia Zibetti (PG)¹, Milena de Nardin (IC)¹, Clarissa P. Frizzo (PQ)¹.

*vinicius.lacorte@acad.ufsm.br

¹ Departamento de Química: Universidade Federal de Santa Maria - UFSM

Palavras Chave: Emulsões, Fluconazol, Líquidos Iônicos, SAILs.

Introdução

O fluconazol é um fármaco antifúngico. No entanto, apresenta problemas de solubilidade, causando limitações na preparação de formulações farmacêuticas e sua liberação em organismos vivos. As emulsões vêm sendo propostas para superar estas limitações, sendo o ultrassom (US), um dos métodos mais eficientes para prepará-las. Líquidos iônicos (LIs) imidazolíneos e anfílicos com cadeias alquílicas longas (≥ 8) são conhecidos como líquidos iônicos ativos na superfície (SAILs) e são bons candidatos a formação de micelas e emulsões. Assim, combinar US e LIs pode ser uma alternativa para preparar emulsões estáveis carregadas com o fluconazol. O Espalhamento de Luz Dinâmico (DLS) é usado para a caracterização de emulsões, uma vez que são analisadas as propriedades físico-químicas de um meio líquido, como diâmetro médio (DM) e índice de polidispersão (IPD) das partículas. Portanto, o objetivo deste projeto é preparar emulsões do fluconazol utilizando SAILs derivados do metilimidazol com cadeia alquílica longa ($n=12$) com ânions brometo, acetato e fenilalaninato como emulsificantes e analisar o DM e IPD das partículas utilizando o DLS.

Resultados e discussão

Preparou-se emulsões do fluconazol utilizando SAILs como emulsificantes e três variações de teor de TCM (30 μL , 50 μL e 82 μL), como fase oleosa. O US foi utilizado como método de energia à temperatura de 25 °C, amplitude de 40 % por 10 minutos. A análise de DM e IPD foram executadas utilizando o DLS com a luz espalhada em ângulo fixo de 90° no 1º dia e no 120º dia, após a preparação. Foram selecionadas uma emulsão para cada LI que apresentou os melhores resultados. Os valores de DM das emulsões com ânion brometo utilizando 30 μL de TCM [US12Br30], ânion acetato com 50 μL de TCM [US12Ace50] e ânion fenilalaninato com 82 μL de TCM [US12Phe82] estão demonstrados na **Tabela 1**, juntamente com o IPD das mesmas emulsões. Na **Figura 1**, é possível visualizar os aspectos visuais das emulsões, sem observação de separação de fase.



Figura 1. Aspecto visual das emulsões.

Tabela 1. Valores de diâmetro médio e IPD das emulsões.

Dia		[US12Br30]	[US12Ace50]	[US12Phe82]
1	Tamanho	197 \pm 13	234 \pm 10	203 \pm 26
120	médio ^a	207 \pm 6	229 \pm 22	231 \pm 23
1	IPD	0,156 \pm 0,03	0,106 \pm 0,01	0,235 \pm 0,05
120		0,111 \pm 0,06	0,150 \pm 0,02	0,143 \pm 0,04

^a Todos os valores estão em nanômetros (nm).

A análise do tamanho médio e IPD das partículas é um parâmetro importante para identificar a estabilidade e a homogeneidade do sistema. O menor diâmetro é crucial para a permeabilidade ou penetração do transportador, pois fornece maior área de superfície para a absorção de fármacos. Através dos dados de DLS foi possível observar que as emulsões apresentaram tamanho de nanoemulsões (<500nm) durante os 120 dias e um IPD <0,3, indicando um sistema monodisperso na distribuição de tamanho e alto grau de homogeneidade.

Conclusões

Conclui-se que as emulsões utilizando SAILs como emulsificantes são estáveis e mostram perspectivas positivas para a superação das limitações utilizando Fluconazol. Destaca-se que o projeto está em andamento e visa executar outras análises de caracterização.

Agradecimentos

UFSM, FAPERGS, CNPq e CAPES.

Referências e notas

- (1) Fica, A. C. *Rev Chil Infect*, **2004**, 1, 26-38.
- (2) Hennemann, B. L. et al. *Ultrason. Sonochem.*, **2021**, 72, 105446.
- (3) Singh, O. et al. *Langmuir*, **2019**, 35, 45, 14586–14595.

Investigação da estabilidade térmica e em solução da curcumina Natural

Rayane Martins Braga^{1*}(IC); Danielle Tapia Bueno¹(PG); Amanda Fonseca Leitzke¹(PG); Juliana da Silva Porciúncula¹(IC); Caroline Ieque Silveira¹(IC); Tamara Mendes Leite Silva Trindade¹(PG); Claudio Martin Pereira de Pereira¹(PQ)

Universidade Federal de Pelotas – Campus Universitário, S/N – CEP: 96160-000, Capão do Leão, RS – Brasil. *rayaneduartebraga@gmail.com

Palavras Chave: Curcumina; estabilidade térmica; estabilidade em solução.

Introdução

A curcumina é conhecida por ser um corante natural e é obtida a partir dos rizomas da *Curcuma longa*¹, além disso, esta é responsável pelo alto potencial terapêutico presente na cúrcuma. Logo, há um grande interesse em volta da curcumina isolada.² Contudo, a curcumina isolada apresenta fotodegradação rápida, que é a perda de cor quando é exposta a luz e ao ar.^{3,4} Além disso, a fração β -dicetona presente na molécula de curcumina, é considerada um centro hidrolítico, e é a partir deste que ocorre a degradação em solução, resultando em diversos produtos.⁵ Nesse sentido, esse estudo teve como objetivo avaliar a estabilidade térmica da curcumina isolada através da análise termogravimétrica e posteriormente avaliar sua estabilidade em solução utilizando cromatografia líquida de alta eficiência.

Resultados e discussão

Para as análises foi utilizada a curcumina natural comercial Sigma-Aldrich com grau de pureza de 65%. A identificação dos curcuminóides na amostra de curcumina se deu através da técnica de cromatografia líquida de alta eficiência com detector de ultravioleta visível (UHPLC-UV-Vis). A curcumina, apresentou tempo de retenção de 3,263 minutos, a demetoxicurcumina de 3,103 minutos e a bisdemetoxicurcumina de 2,957 minutos.

A análise termogravimétrica (TGA) foi realizada em equipamento Shimadzu modelo DTG-60. A escolha dos parâmetros se deu de acordo com a metodologia adaptada de Li et al., (2021).⁶ Foi utilizada uma rampa de aquecimento de 10 °C/min, iniciando em 30 °C e terminando em 800 °C, em atmosfera inerte (N₂ – 50 mL/min).

Conforme é possível observar na Figura 1, a curva de TGA da curcumina começa sua decomposição por volta de 190 °C, este evento térmico é atribuído à desidroxilação. Sua perda total de massa ocorre por volta de 630 °C.

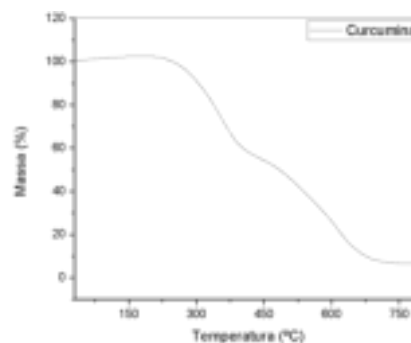


Figura 1. Curva de TGA da curcumina.

Conclusões

Pode-se observar que a presença de outros curcuminóides na amostra de curcumina não afetou sua estabilidade térmica. Estudos utilizando UHPLC-UV-Vis para avaliar a estabilidade em solução da curcumina estão em andamento. A estabilidade dessa molécula é de suma importância, pois é amplamente utilizada em diversas áreas.

Agradecimentos

UFPel, CAPES, FAPERGS, CNPq e INCT Forense.

Referências e notas

- (1) SRAVANI, A. B. et al. *Journal of Fluorescence*, p. 1517–1527, 2022.
- (2) PEREIRA, CLAUDIO M. P.; PACHECO, BRUNA S.; SILVA, C. C. *LAP LAMBERT Academic Publishing*, 2017.
- (3) BULIGA, D. I. et al. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, v. 432, n. February, p. 114085, 2022.
- (4) SOUZA, C. R. A.; OSME, S. F.; GLÓRIA, M. B. A. *Journal of Food Processing and Preservation*, v. 21, n. 5, p. 353–363, 1997.
- (5) KUMAR, P. et al. *Journal of Inorganic Biochemistry*, v. 222, n. August 2020, p. 111494, 2021.
- (6) LI, S. et al. *Frontiers in Chemistry*, v. 9, n. December, p. 1–13, 2021.

FeCl₃/TBAB como sistema fotocatalítico na síntese de quinazolinonas mediada por luz azul.

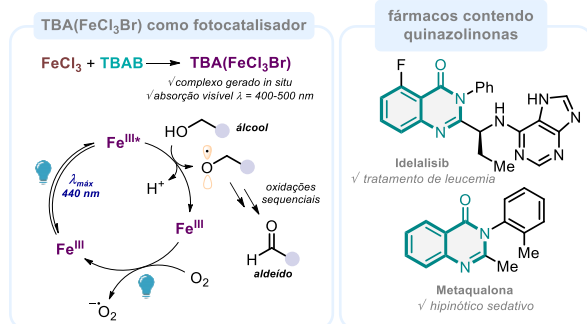
Mateus Wagner Rambo (IC)*, Viviane Tessmer Mena (IC), Luiz Henrique Dapper (PG), Eder João Lenardão (PQ), Ricardo Frederico Schumacher (PQ), Filipe Penteadó (PQ).

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria, ²Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Laboratório de Síntese Orgânica Limpa, Universidade Federal de Pelotas. E-mail: mateus.wagner@acad.ufsm.br (MWR)

Palavras-Chave: fotocatalise, FeCl₃, TBAB, oxidação, quinazolinonas.

Introdução

Nas últimas décadas, a química verde vem se estabelecendo como uma importante ferramenta para o desenvolvimento da síntese orgânica, tendo como um de seus fundamentais princípios a busca pela eficiência energética (princípio #6). Neste contexto, o uso de luz como fonte de energia, através da aplicação de processos fotocatalíticos, mostra-se como uma importante ferramenta para o desenvolvimento de processos químicos sustentáveis.¹ Assim, uma vez que o Fe figura entre os metais mais abundantes da superfície terrestre, é de grande interesse o desenvolvimento de sistemas fotocatalíticos explorando a habilidade redox de seus derivados (Fe⁺²/Fe⁺³), a fim de se obter métodos de síntese mais eficientes e economicamente viáveis.² Deste modo, este trabalho tem como objetivo a utilização do sistema FeCl₃/TBAB, como fotocatalisador para a síntese de quinazolinonas, as quais são importantes unidades estruturais, frequentemente encontradas em medicamentos comercializados mundialmente, como por exemplo o Idelalisib e a Metaqualona (Esquema 1).



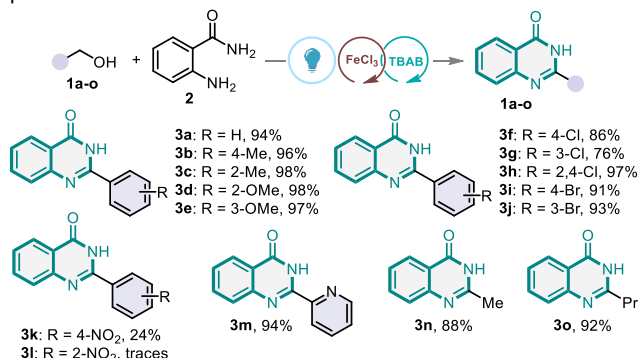
Esquema 1. Sistema TBA(FeCl₃Br) como foto catalisador e fármacos derivados das quinazolinonas

Resultados e discussão

Assim, uma biblioteca de quatorze derivados das quinazolinonas **3a-o** foram preparados em rendimentos excelentes, reagindo a antranilamida **2** com diferentes álcoois benzílicos e alifáticos **1a-o**, na

presença de 15 mol% de FeCl₃/TBAB como fotocatalisador, MeCN como solvente, sendo a solução resultante irradiada com luz azul (LED 50W) durante 16 horas (Esquema 2).

Esquema 2. Esquema reacional e tabela de exemplos de quinazolinonas obtidas.



Conclusões

Com os resultados obtidos, pode-se concluir que o método proposto apresentou grande eficiência na síntese dos compostos de interesse, abrindo novos horizontes na aplicação de espécies de Fe como fotocatalisadores em síntese orgânica. Mais informações sobre aspectos específicos do trabalho, como o mecanismo reacional, podem ser consultadas na sessão de posters.

Agradecimentos

Trabalho apoiado pelos programas de bolsas de iniciação científica PIBIC-CNPq e PROBIC-FAPERGS. Trabalho financiado pela FAPERGS (Projeto ARD 23/2551-0000800-9).

Referencias e notas

- Prier, C. K.; Rankic, D. A.; MacMillan, D. W. C. *Chem. Rev.* **2013**, *113*, 5322.
- Li, S.; Zhu, B.; Lee, R.; Qiao, B.; Jiang, Z. *Org. Chem. Front.* **2018**, *5*, 380.

Oxalato Amoniacal de Nióbio (ANO) como um catalisador eficiente na reação de Paal-Knorr para síntese de pirróis *N*-substituídos

Luiz H. Dapper^{1*} (PG), Kethelyn M. da Rosa¹ (PG), Viviane T. Mena¹ (IC), Filipe Penteado² (PQ) e Eder J. Lenardão¹ (PQ). *luizdapper@yahoo.com.br

¹Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos – CCQFA. Universidade Federal de Pelotas – UFPel. Caixa Postal 354, 96010-900, Pelotas, RS, Brasil.

²Departamento de Química, Centro de Ciências Naturais e Exatas – CCNE, Universidade Federal de Santa Maria – UFSM, Av. Roraima, Prédio 18, 97105-340, Santa Maria, RS, Brasil.

Palavras-chave: Oxalato Amoniacal de Nióbio, ANO, Pirróis, Reação de Paal-Knorr, compostos dicarbonílicos.

Introdução

A Química Verde vem desempenhando um importante papel orientador na busca por rotas sintéticas que visam a criação de novas moléculas ou a modificação química de moléculas já existentes.¹ Atrelado a isso, heterociclos nitrogenados apresentam grande destaque para os químicos orgânicos sintéticos devido a suas propriedades medicinais e agroquímicas.² Dentre estes, o núcleo pirrólico deve ser evidenciado, podendo ser encontrado em porfirinas naturais e estando presente em uma série de fármacos com as mais diversas atividades.³

O oxalato amoniacal de nióbio (ANO) é um sólido branco, estável, de fácil manuseio e baixo custo que pode ser utilizado em síntese orgânica como um catalisador de grande versatilidade, ainda mais se puder atuar de forma heterogênea, podendo ser recuperado e reutilizado várias vezes.⁴

Portanto, o alto valor agregado do núcleo pirrólico e as vantagens da catálise de nióbio se unem como potenciais aliados para a obtenção de uma química mais limpa na síntese de pirróis *N*-substituídos pela reação de Paal-Knorr.

Resultados e discussão

Buscando a síntese de pirróis *N*-substituídos via reação de Paal-Knorr, diversas variáveis foram testadas para obter a melhor condição reacional, como tempo, temperatura, necessidade da utilização de catalisador e quantidade catalítica. Dessa forma, baseando-se nos resultados obtidos, a melhor condição reacional foi estabelecida com uma mistura equimolar de 0,5 mmol cada entre 2,5-hexanodiona **1** e anilina **2a**, 12 mol% de ANO como catalisador, 1,5 mL de etanol como solvente à temperatura ambiente, resultando na formação do produto **3a** em 93% de rendimento. Sendo assim, determinada a condição ideal, foram sintetizados diversos derivados pirrólicos

com rendimentos que variaram de razoáveis a excelentes (36-99%) (Figura 1).

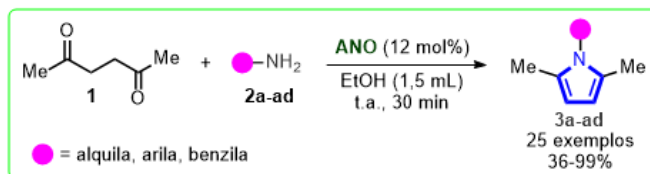


Figura 1. Síntese de pirróis *N*-substituídos via condensação de Paal-Knorr.

Devido à heterogeneidade do ANO no sistema, uma série de experimentos foram realizados com o intuito de verificar a possibilidade de seu reuso. Dessa forma, foi verificado que o ANO manteve uma boa atividade catalítica mesmo após 7 ciclos, comprovando sua estabilidade química.

Conclusões

Em vista do que foi exposto, alguns princípios da Química Verde foram seguidos para a síntese de uma unidade estrutural de grande potencial farmacológico. Com isso, 25 pirróis *N*-substituídos foram sintetizados em bons rendimentos através de uma metodologia branda, utilizando ANO como um catalisador estável e de baixo custo.

Agradecimentos

Os autores agradecem aos órgãos de fomento, CNPq, CAPES e FAPERGS.

Referencias e notas

- (1) Lenardão, E. J.; Freitag, R. A.; Dabdoub M. J.; Batista, A. C. F. Silveira, C. C. *Quim. Nova.* **2003**, *26*, 123.
- (2) Jeschke, P. *Eur. J. Org. Chem.* **2022**, e202101513.
- (3) Basha, N. J.; Basavarajiah, S. M.; Shyamsunder, K. *Mol. Divers.* **2022**, *26*, 2915.
- (4) Barros, J. C.; Fortes, L.; Monte, P. M.; Silva, A. P. P. M.; Barros, J. C.; Silva, T. L. *SynOpen.* **2021**, *3*, 252.

Síntese, caracterização e estudo da agregação de líquido iônico imidazolíneo ligado covalentemente a compostos aromáticos.

Letícia Zibetti (PG)^{1*}, Victor dos Santos Pereira (PG)¹, Thaíssa Silva Beck (PG)¹, Bruno Stona Cassol dos Santos (IC)¹, Caroline Raquel Bender (PQ)¹, Clarissa Piccinin Frizzo (PQ)¹. *leti.zibetti@hotmail.com

¹ Departamento de Química: Universidade Federal de Santa Maria - UFSM

Palavras Chave: Líquidos Iônicos, compostos aromáticos, síntese, agregação.

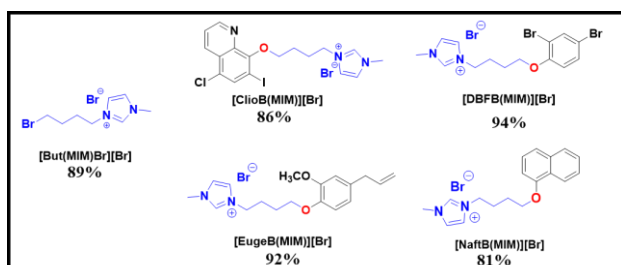
Introdução

Líquidos Iônicos (LIs) surgiram como uma classe versátil de materiais com propriedades físico-químicas notáveis, tornando-os inestimáveis em diversas aplicações científicas e industriais, incluindo a área farmacêutica devido a suas propriedades biológicas.¹ Compostos heterociclos/aromáticos têm sido estudados na síntese de produtos farmacêuticos.² No entanto, a aplicação desses compostos nesta área é limitada, devido à baixa solubilidade e à baixa estabilidade química em relação às mudanças de pH. A combinação de LIs com heterociclos biologicamente ativos pode unir as excelentes propriedades de ambas as estruturas e promover efeitos sinérgicos. A concentração de agregação crítica (CAC) influencia diretamente a solubilidade, a biodisponibilidade e a estabilidade dos compostos ativos nos medicamentos. Assim, o objetivo do presente estudo é ligar covalentemente o LI [But(MIM)Br][Br] a compostos aromáticos (clioquinol, eugenol, 2,4-dibromofenol, 1-naftol) e investigar a mudança nas propriedades físico-químicas desses compostos e os parâmetros de agregação dos mesmos.

Resultados e discussão

Foram sintetizados quatro compostos utilizando a estratégia de O-alkilação dos compostos aromáticos com o LI [But(MIM)Br][Br]. Para a síntese, foi utilizado K₂CO₃. Na **Figura 1**, encontram-se demonstradas as estruturas dos compostos sintetizados.

Figura 1. Estruturas químicas dos compostos sintetizados neste trabalho.



Os compostos foram caracterizados utilizando RMN (¹H e ¹³C), FTIR, TGA, DSC, solubilidade, densidade e os parâmetros termodinâmicos de agregação foram avaliados utilizando as técnicas de condutividade, tensão superficial e espalhamento de luz dinâmico (DLS). Resultados promissores foram obtidos, como ganho de estabilidade térmica, melhora na solubilidade em água, além dos dados termodinâmicos de agregação (**Tabela 1**) que indicaram que o processo de agregação de todos os compostos estudados é espontâneo e exotérmico, devido aos valores negativos de ΔG°_{agg} . As medições de tensão superficial e de DLS apresentaram valores próximos aos obtidos por condutividade.

Tabela 1. Valores de CAC usando técnicas de condutividade, tensão superficial e DLS, em solução aquosa a 25 °C, em mM.

LI	Condutividade	Tensão Superficial	DLS
[But(MIM)Br][Br]	72 ± 1	71 ± 1	69 ± 2
[ClioB(MIM)][Br]	32 ± 1	19 ± 2	18 ± 3
[DBFB(MIM)][Br]	18 ± 2	27 ± 2	22 ± 2
[EugeB(MIM)][Br]	101 ± 2	101 ± 1	97 ± 3
[NaftB(MIM)][Br]	32 ± 3	28 ± 2	31 ± 2

Conclusões

Excelentes rendimentos foram obtidos, além de serem observadas melhorias nas propriedades físicas dos compostos. A partir dos dados de agregação foi possível observar que as medições de tensão superficial e de DLS contribuíram ainda mais para a compreensão das interações e tendências de agregação dos compostos.

Agradecimentos

UFSM, FAPERGS, CNPq e CAPES.

Referencias e notas

- (1) Tsukasa, T. *Adv. Mater.* **2010**, *22*, 1196.
- (2) Perin, N. *Bioorg. Med. Chem.* **2011**, *19*, 6329.

Síntese de 3-sulfeniltiocromonas promovida por luz visível

Ricardo H. Bartz^{1,*} (PG), Krigor B. Silva¹ (PG), Rafaela R. S. A. Santos¹ (IC), Thiago J. Peglow¹ (PG), Eder J. Lenardão¹ (PQ), Bernardo A. Iglesias² (PQ), Filipe Penteadó² (PQ), Raquel G. Jacob¹ (PQ), Gelson Perin¹ (PQ).
*quimricardo20@gmail.com.

¹ Laboratório de Síntese Orgânica Limpa - LASOL, CCQFA, Universidade Federal de Pelotas - UFPel, P.O. Box 354 - 96010-900, Pelotas, RS, Brasil.

² Departamento de Química, Centro de Ciências Naturais e Exatas – CCNE, Universidade Federal de Santa Maria – UFSM, Av. Roraima, CEP: 97105-340, Santa Maria - RS, Brasil.

Palavras Chave: 3-Sulfeniltiocromonas, Luz visível, Ciclização.

Introdução

A síntese de novas moléculas organossulfuradas é uma área de grande importância na química medicinal, pois são encontrados em vários compostos de ocorrência natural e de medicamentos comercializados.¹ Entre as várias substâncias orgânicas contendo átomos de enxofre, destacam-se os derivados de tiocromonas, que são tiopironas benzo-fundidas pertencentes a família das flavonas. Essa classe de compostos é encontrada na estrutura central de vários alimentos e em muitas substâncias com propriedades farmacêuticas.² Portanto, considerando a importância dos compostos organoenxofre e dos derivados de tiocromonas descrevemos a ciclização de *orto*-tioarilnonas **1** e tióis **2** para a obtenção de 3-sulfeniltiocromonas **3** utilizando luz visível como fonte alternativa de energia.³

Resultados e discussão

As reações foram realizadas eficientemente em condições amenas, empregando LEDs azuis (50 W) como fonte alternativa de energia, acetona como solvente (2 mL), em atmosfera aberta à temperatura ambiente (25 °C), usando como substratos uma gama de *orto*-tioarilnonas **1** e tióis **2**, substituídos com grupos doadores e retiradores de elétrons bem como grupos alquílicos e heteroaromáticos. De forma geral, o efeito dos grupos substituintes (R e R¹) não afetou a reatividade da reação. A maior limitação do método foi encontrada no emprego do propanotiol, o qual não levou a formação do produto **3i**. Assim sob as condições otimizadas foram obtidos eficientemente 21 derivados 3-sulfeniltiocromonas **3**, em rendimentos de 28% a 95% em tempos reacionais que variaram de 1-24 h. Na Figura 1, estão representados alguns exemplos de 3-sulfeniltiocromonas **3** que foram preparados neste trabalho.

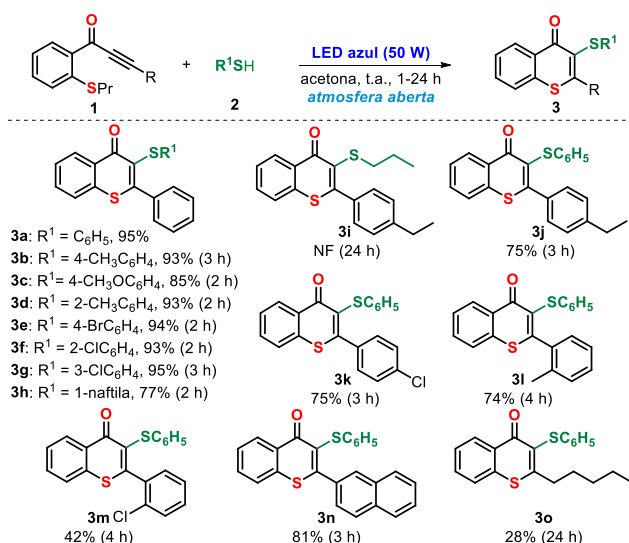


Figura 1. Síntese e variação do escopo reacional.

Conclusões

Em conclusão, foi possível realizar a síntese eficiente de novas 3-sulfeniltiocromonas a partir da reação de ciclização entre *orto*-tioarilnonas e tióis utilizando luz visível. O método envolve condições brandas, eliminando a necessidade de aquecimento, atmosfera inerte, fotocatalisadores ou espécies auxiliares.

Agradecimentos

CAPES, FAPERGS, CNPq e FINEP são reconhecidos pelo apoio financeiro.

Referências e notas

- (1) Laxmikeshav, K.; Kumari, P.; Shankaraiah, N. *Med. Res. Rev.* **2022**, *42*, 513.
- (2) Mutha, R. E.; Tatiya, A. U.; Surana, S. J. *Future J. Pharm. Sci.* **2021**, *7*, 25.
- (3) Bartz, R. H.; Silva, K. B.; Santos, R. R. S. A.; Peglow, T. J.; Lenardão, E. J.; Iglesias, B. A.; Penteadó, F.; Perin, G.; Jacob, R. G. *ChemCatChem* **2023**, *15*, e202201557.

Síntese, Caracterização e Avaliação das Propriedades Térmicas de Novos Líquidos Mono e Dianiônicos Derivados de Ânions Carboxilatos

Julia Eduarda Spode¹(IC)*; José Lúcio Bauer Vieira¹(IC); Jean Carlos Bauer Vieira¹(PG); Genilson dos Santos Pereira¹(PG); Clarissa Piccinin Frizzo¹(PQ); Caroline Raquel Bender¹(PQ).

*julia.spode@acad.ufsm.br

¹Núcleo de Química de Heterociclos, Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria.

Palavras Chave: Líquidos Iônicos, Síntese, Caracterização, Perfil Térmico.

Introdução

Líquidos iônicos (LIs) são definidos como sais orgânicos constituídos por cátions orgânicos e ânions orgânicos ou inorgânicos, que possuem propriedades físico-químicas ajustáveis mediante modificações na estrutura [1]. Para promover avanços em relação à aplicabilidade dos LIs é fundamental conhecer a estabilidade térmica desses compostos e sua faixa de trabalho segura [2]. Deste modo, este trabalho objetivou sintetizar, caracterizar e verificar as propriedades térmicas novos líquidos iônicos derivados do cátion etilmetilimidazólio [EtMIM]⁺ e ânions mono e carboxilatos (Figura 1) através de dados de Ressonância Magnética Nuclear (RMN), Análise Termogravimétrica (TGA) e Calorimetria Exploratória Diferencial (DSC).

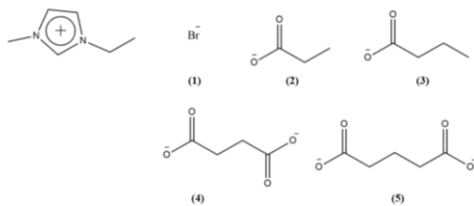


Figura 1: Série de líquidos iônicos em estudo.

Resultados e discussão

A síntese dos LIs deu-se por meio de uma substituição nucleofílica de segunda ordem (S_N2) entre o metilimidazol e o bromoetano, seguida de troca de ânion (Br⁻ pela OH⁻) utilizando resina de troca iônica e posterior reação dos LI hidroxilados com os ácidos carboxílicos, para obtenção dos produtos de interesse. Ao final, as estruturas foram caracterizadas por RMN de ¹H e ¹³C. Os espectros do [EtMIM][Glu] podem ser observados na Figura 2.

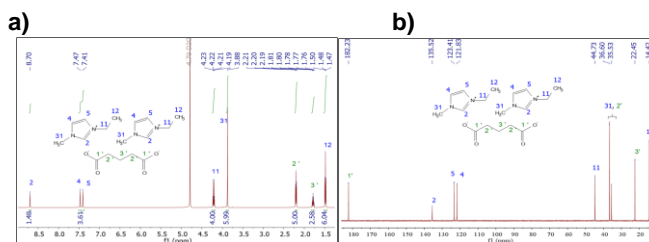


Figura 2. Espectros de a) ¹H e b) ¹³C do [2EtMIM][Glu]

A partir das análises térmicas (TGA e DSC) dos compostos obtiveram-se os dados da Tabela 1.

Tabela 1. Dados térmicos de TGA e DSC.

LIs	T _{1%} / °C	T _{5%} / °C	T _g / °C
[EtMIM][Pro]	125,9	186,2	a
[EtMIM][But]	167,8	188,5	38,76 ± 0,14
[2EtMIM][Suc]	174,2	197,5	-
[2EtMIM][Glu]	185,8	205,4	-39,30 ± 0,06; -15,49

^aDados em fase de aquisição.

Conclusões

Dados de TGA evidenciaram que os LIs dianiônicos, ainda não reportados na literatura, tendem a ser termicamente mais estáveis em relação ao seus análogos monoaniônicos. Os dados de DSC obtidos até o momento, demonstraram que [EtMIM][But] e [2EtMIM][Glu] apresentaram transição vítrea na faixa de temperatura avaliada, indicando presença de material amorfo.

Agradecimentos

Fundo de Incentivo à Pesquisa (FIPE) – UFSM, CAPES, CNPQ e FAPERGS

Referências e notas

- MARTINS, M. A. P. et al. *Chem. Rev.* 108 (2014), 6, 2015.
- FRIZZO, C. P. et al. *ACS Omega*, 3 (2018) 1, 734.

Síntese de organocalcogenilcromenos promovida por Oxone®

Paola dos Santos Hellwig^{1,*} (PG), Angelita M. Barcellos¹ (PQ), Roberta Cargnelutti³ (PQ), Thiago Barcellos⁴ (PQ), Gelson Perin¹ (PQ). *paolahellwig@gmail.com

¹ Laboratório de Síntese Orgânica Limpa - LASOL, CCQFA, Universidade Federal de Pelotas - UFPel, 96010-900, Pelotas, RS, Brasil.

² Departamento de Química, CCNE, Universidade Federal de Santa Maria - UFSM, 97105-900, Santa Maria, RS, Brasil.

³ Laboratório de Biotecnologia de Produtos Naturais e Sintéticos, Universidade de Caxias do Sul, 95070-560, Caxias do Sul, RS, Brasil.

Palavras Chave: Calcogenilcromenos, Organocalcogênios, Ciclização

Introdução

Os cromenos são uma importante unidade estrutural presente em produtos naturais e em compostos farmacologicamente ativos.¹ Assim, considerando a relevância dos cromenos e os inúmeros estudos realizados pelo nosso grupo de pesquisa acerca da síntese de novos compostos organocalcogênios através de reações de ciclização,² este trabalho descreve a reação de carbocilização intramolecular de éteres aril propargílicos **1** utilizando dicalcogenetos de diorganoíla **2** e Oxone® para a síntese de calcogenilcromenos **3** (Figura 1).³

Resultados e discussão

O método desenvolvido se mostrou eficaz ao uso de vários éteres aril propargílicos **1** substituídos com grupos doadores e retiradores de elétrons nas posições R e R¹ e de dicalcogenetos de diorganoíla **2** substituídos com grupos doadores e retiradores de elétrons, além de grupos alquílico e heteroaromático, produzindo os calcogenilcromenos **3** em rendimentos de 58% a 98%. Cabe ressaltar, que as reações foram promovidas por espécies radiculares de calcogênio geradas *in situ* pela reação entre os dicalcogenetos de diorganoíla **2** e o Oxone®, utilizando acetonitrila (3,0 mL) como solvente em tubo selado a 100 °C.

Adicionalmente, utilizando as mesmas condições reacionais otimizadas, foi possível sintetizar três exemplos de selanilcromenos derivados de produtos naturais, como umbeliferona, vanilina e salicilato de metila. Os produtos **4-6** foram obtidos com rendimento de 50-65%, após 1-2 h de reação. A Figura 1 mostra alguns exemplos selecionados dos calcogenilcromenos **3** que foram preparados neste trabalho.

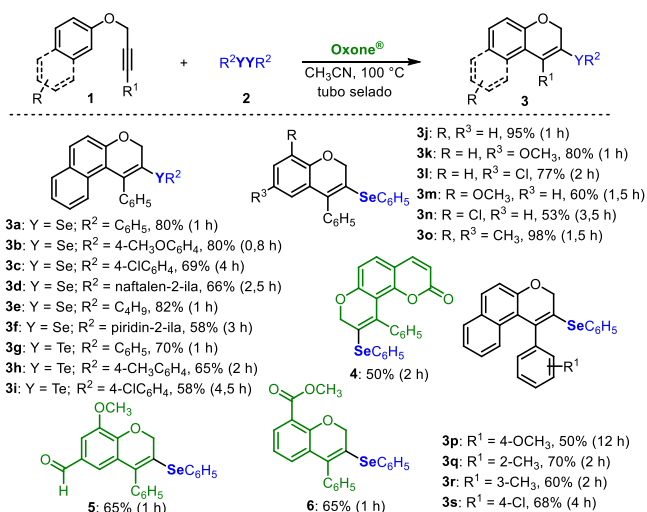


Figura 1. Exemplos selecionados dos calcogenilcromenos sintetizados **3**

Conclusões

Em resumo, foi demonstrada a síntese de organocalcogenilcromenos a partir da reação entre dicalcogenetos de diorganoíla e éteres aril propargílicos, promovida por Oxone®. Foi possível obter 31 compostos em rendimentos de até 98% após curtos tempos reacionais (0,8-4 h).

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPERGS e FINEP pelo apoio financeiro.

Referências

- (1) Liang, C.; Kjaerulff, L.; Hansen, P. R.; Kongstad, K. T.; Staerk, D. *J. Nat. Prod.* **2021**, *84*, 2454.
- (2) Goulart, H. A.; Araujo, D. R.; Penteado, F.; Jacob, R. G.; Perin, G.; Lenardão, E. J. *Molecules* **2021**, *26*, 7523.
- (3) Hellwig, P. S.; Barcellos, A. M.; Cargnelutti, R.; Barcellos, T.; Perin, G. *J. Org. Chem.* **2022**, *87*, 15050.

Síntese de 3-Organosselaniltiocromonas e Cromonas promovida por Oxone®

Krigror B. Silva*¹ (PG), Ricardo H. Bartz¹ (PG), Thiago J. Peglow¹ (PG), Angelita M. Barcellos² (PQ), Raquel G. Jacob¹ (PQ), Eder J. Lenardão¹ (PQ), Gelson Perin¹ (PQ). * krigrbastos@gmail.com

¹ Laboratório de Síntese Orgânica Limpa - LASOL, CCQFA, Universidade Federal de Pelotas - Campus Capão do Leão, 96010-900.

² Universidade Federal do Rio Grande - Escola de Química e Alimentos - Campus Carreiros, 96203000.

Palavras Chave: Organosselênio, Tiocromonas, Cromonas, Oxone®

Introdução

Os flavonoides são uma importante classe de compostos encontrados em muitas substâncias de origem natural e também em produtos farmacêuticos. Entre os inúmeros flavonoides existentes, destacam-se as cromonas e as tiocromonas, pois estão presentes em diversas moléculas bioativas.¹ Adicionalmente, a construção de novas ligações C-Se é de grande importância em síntese orgânica, visto que os compostos organosselênio apresentam diversas atividades biológicas importantes, bem como aplicações como intermediários sintéticos.² Com base nisso, o objetivo deste trabalho é realizar a síntese de 3-organosselaniltiocromonas **4** e de 3-organosselanilcromonas **5** a partir da reação de ciclização de diferentes alquil aril cetonas **1** ou **2** e disselenetos diorganoíla **3** utilizando Oxone® como oxidante verde.

Resultados e discussão

As tiocromonas **4** e cromonas **5** foram eficientemente preparadas empregando o agente oxidante verde Oxone®, acetonitrila como solvente (2 mL) a 82 °C (banho de óleo) sob atmosfera aberta, utilizando como substratos uma gama de alquil aril cetonas **1** ou **2** e disselenetos de diorganoíla **3**, substituídos com grupos doadores e retiradores de elétrons, bem como grupo alquílico. O método desenvolvido se mostrou versátil, fornecendo eficientemente dez derivados de 3-organosselaniltiocromonas **4** pouco explorados até o momento, com rendimentos variando de 55% a 94% após 1-2 h de reação (Figura 1). O rendimento mais baixo, foi observado quando se utilizou o disseleneto de dibutila, sendo observado neste caso a formação de subprodutos que acarretaram no decréscimo do rendimento da reação. Além disso, o método também pode ser estendido à síntese de derivados de cromonas **5**. Assim, sob as condições otimizadas, foram preparados onze derivados de 3-

organosselanilcromonas **5**, com rendimentos de 60% a 95% após tempos de reação de 1-24 h (Figura 1).

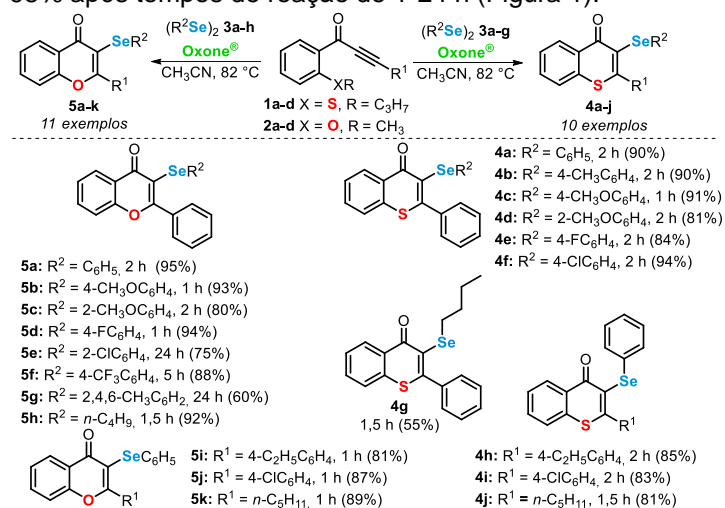


Figura 1. Variação do escopo reacional.

Conclusões

Como conclusão, foi possível realizar a síntese eficiente de 3-organosselaniltiocromonas e cromonas a partir da reação de ciclização entre alquil aril cetonas e disselenetos de diorganoíla promovida por Oxone®. O permitiu a síntese de 21 compostos com rendimentos bons a excelentes (55-95%) em tempos de reação variando de 1-24 h.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPERGS e FINEP pelo apoio financeiro.

Referências e notas

- (1) Panche, A. N.; Diwan, A. D.; Chandra, S. R. *J. Nutr. Sci.* **2016**, *5*, 1-15.
- (2) Lenardão, E. J.; Santi, C.; Perin, G.; Alves, D. *Organochalcogen Compounds Synthesis, Catalysis and New Protocols with Greener Perspectives*. 1. ed.: Elsevier, Amsterdam, 2022.

Análise das Propriedades Térmicas de Líquidos Iônicos Derivados dos Cátions Imidazólio e Colina com Contraíons Carboxilatos

Heitor M. Mendes (IC)*; Jean C. B. Vieira (PG); Thaissa Beck (PG); Amanda Carginin (PG); Guilherme Moleta (IC); Clarissa P. Fizzo(PQ); Caroline R. Bender (PQ)

*heitormarconato@gmail.com

¹Núcleo de Química de Heterociclos (NUQUIMHE), Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria.

Palavras Chave: Líquidos Iônicos, TGA, DSC, Análise Térmica

Introdução

Os Líquidos Iônicos (LIs) vêm sendo utilizados em uma variedade de aplicações, devido às suas propriedades ajustáveis. Modificações estruturais no cátion ou nos ânions dos LI permitem a obtenção deles com características relacionadas a aplicações específicas.¹ Visando promover os avanços em relação à aplicação dos LIs, o entendimento das suas propriedades térmicas é altamente requerido.² Em vista disso, o objetivo do trabalho é estudar as propriedades térmicas relacionadas a mudança de estado físico e processo de decomposição de diferentes LIs derivados dos cátions imidazólio e colina, e ânion derivados de ácidos carboxílicos de cadeia longa (**Figura 1**).

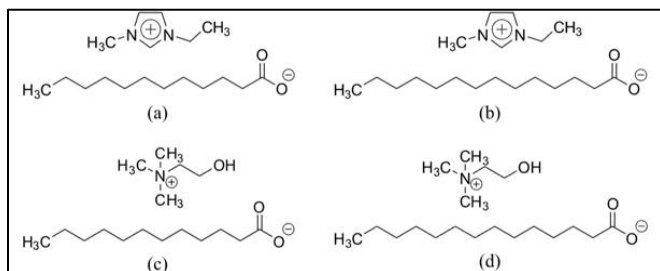


Figura 1: Líquidos iônicos derivados do cátion imidazol e colina ânions de (a,c) ácido láurico, e (b,d) ácido mirístico.

Resultados e discussão

Os resultados obtidos a partir de análises de TGA e DSC estão apresentados nas **Tabelas 1 e 2**.

Tabela 1. TGA data para LIs

LIs	Td ₁ ^b	%d ₁ ^c	Td ₂ ^d	%d ₂ ^e
[EtIM][C ₁₂ COO]	231	83	280	5
[EtIM][C ₁₄ COO]	232	88	281	4
[Cho][C ₁₂ COO]	205	62	240	25
[Cho][C ₁₄ COO]	212	60	493	26

^a Temperatura inicial de decomposição; ^{b,d} Primeira e segunda temperatura máxima de decomposição da amostra; ^{c,e} Percentual de decomposição.

Tabela 2. DSC data para LIs

	[EtIM][C ₁₂ OO]	[EtIM][C ₁₄ OO]	[Cho][C ₁₂ OO]	[Cho][C ₁₄ OO]
T _{c1} ^a	-6,9 (± 0.72)	11,32 (±1.25)	122.18 (±0.57)	-28.86
ΔH _{c1} ^b	20.05 (±0.67)	15.80 (±1.49)	16.30 (±0.21)	15.97
T _{f1} ^c	23.9 (±2.17)	25.17 (±0.08)	26.39 (±0.205)	-7.25
ΔH _{f1} ^d	25.17 (±5.60)	23.42 (±0.17)	16.30 (±0.208)	16.06
T _{c2} ^a	-0.48 (±0.05)	17.09 (±0.04)	8.79 (±0.43)	-
ΔH _{c1} ^b	8.148 (±2.53)	8.372 (±2.84)	5.98 (±0.37)	-
T _{f2} ^c	-	-	126.81 (±1.31)	39.00
ΔH _{f2} ^d	-	-	2.47 (±0.27)	121.02

^a Temperatura de cristalização (°C); ^b Entalpia de cristalização (kJ/mol); ^c Temperatura de fusão (°C); ^d Entalpia de fusão (kJ/mol).

Conclusões

De forma geral, os LIs derivados do cátion colina possuem valores de Td menor do que os derivados do metilimidazol. Além disso, os LIs derivados da colina tem aumento de Td mais significativo em função do aumento do tamanho da cadeia alquílica. Os dados de DSC, mostraram que todos os LIs apresentaram dados de Tf e Tc evidenciando o caráter cristalino das amostras, na faixa de temperatura avaliada. O [EtIM][C₁₄OO] apresentou temperatura de transição vítrea, indicando uma porcentagem de material amorfo.

Agradecimentos

Agradecimento a CAPES, CNPq e FAPERGS.

Referencias e notas

- Frizzo, C. P. Tier, A. Bender, C. R. et al. Structural and Physical Aspects of Ionic Liquid Aggregates in Solution. In *Ionic Liquids - Current State of the Art*. Intechopen, **2015**, 1-40.
- Vieira, J.C.B. Paz, A. Hennemann, B et al. *J. Mol. Liq.* **2020**, 298, 112077.

Síntese *one-pot* de bromopillar[5]areno: eficiente alternativa à obtenção de macrocilos

Yasmin Petter da Veiga (IC)^{1*}, Maria Eduarda Sedrez Costa (IC)¹, Ricardo Ferreira Affeldt (PQ)¹.

yasmin.veiga@grad.ufsc.br

¹Laboratório de Catálise e Fenômenos Interfaciais – Depto. de Química – UFSC – Florianópolis, Brasil

Palavras Chave: Macrociclo, Supramolecular, Pillarareno, One-pot.

Introdução

Os pillararenos são macromoléculas, formadas por unidades de hidroquinona que possuem uma cavidade capaz de interagir com outros compostos por meio do sistema *host-guest*,¹ permitindo uma infinidade de aplicações como drug delivery, sensores fluorescentes e sistemas antibacterianos.² Devido a sua aparição em artigos científicos ainda ser muito recente, as técnicas de síntese estão constantemente sendo aprimoradas. Este trabalho visa desenvolver técnicas de otimização de síntese de derivados do pilar[5]areno.

Resultados e discussão

Com o objetivo de otimizar e melhorar as condições reacionais para a síntese do bromopillar[5]areno, foi realizada a síntese da bromohidroquinona **2**, partindo da hidroquinona comercial **1**. Após otimização das condições reacionais foi possível obter o produto **2** em alto rendimento (94%) na escala de 10 mmols à temperatura ambiente sem a necessidade de purificação.

Embora a etapa de ciclização (**2**→**3**) seja bem descrita na literatura, esta se mostra dependente de diversas variáveis, o que resulta em formação de polímeros e baixa reprodutibilidade. A reação utilizando 2,2 equivalentes de paraformaldeído (PFA) e de eterato de trifluoreto de boro como ácido de Lewis, levou ao produto **3** com rendimentos em torno de 13% após 2h ou mais de reação. No entanto, ao aumentar as quantidades de PFA para 3,0 equivalente e diminuir o ácido de Lewis para 1 equivalente, foi possível obter o produto com 74% de rendimento em apenas 30 minutos, após purificação por cromatografia em coluna. Em ambas as condições foi utilizado o dicloroetano (DCE) como solvente, apesar de terem sido realizadas tentativas com diclorometano que levaram a rendimentos muito baixos.

Uma vez que ambas as condições foram otimizadas, foi realizada uma tentativa de síntese *one-pot* do bromopillar[5]areno **3** em 4,5h utilizando apenas DCE como solvente e a adição dos reagentes de maneira consecutiva (Figura 1).

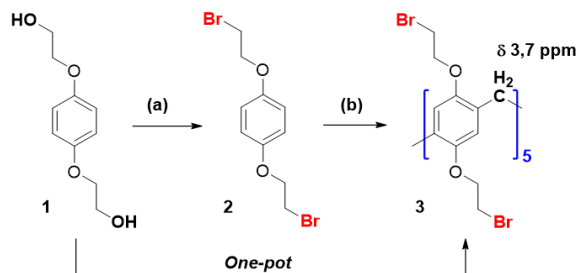


Figura 1. Síntese do bromopillar[5]areno. Condições: (a) PPh₃, CBr₄, ACN; (b) H₂CHO, BF₃OEt₂, DCE.

É importante salientar que a formação do produto cíclico foi monitorada por ¹H RMN da mistura reacional com o aparecimento do simpleto correspondente aos hidrogênios metilênicos em torno de 3,7 ppm. Embora este núcleo ressoe em frequências mais baixas quando comparado ao produto purificado ($\Delta\delta = -0,2$ ppm), isto pode ser atribuído à formação de agregados ou mesmo devido à presença do óxido de trifetilfosfina, único subproduto observado.

Está sendo desenvolvido também um método *one-pot* utilizando o grupo tosila em substituição ao brometo. Além disso, a funcionalização e formação de supramoléculas com substratos aromáticos vem sendo estudada pelo nosso grupo de pesquisa.³

Conclusões

Foi realizado um procedimento simples e eficiente para a obtenção do bromopillar[5]areno, importante material de partida para a obtenção de receptores supramoleculares funcionalizados.

Agradecimentos

INCT-Catálise, CNPq, CAPES, FAPESC e à UFSC.

Referências e notas

- (1) OGOSHI, T. et al. **2008**, J. Am. Chem. Soc. 130, 5022.
- (2) ZYRYANOV, Grigory V. et al. **2023**. International Journal of Molecular Sciences, 24, 5167.
- (3) DEMOS, W. et al. **2023**. J. Braz. Chem. Soc. (ASAP).

Síntese e caracterização de líquidos iônicos derivados de 2-fenilbenzimidazol

William G. Volpato^{1*} (PG), Clarissa P. Frizzo¹ (PQ).

williamgvolpato@gmail.com

¹ Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria.

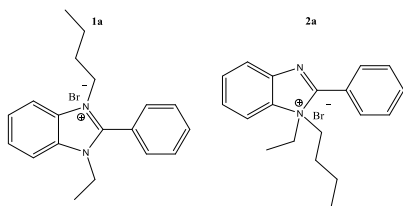
Palavras Chave: Líquidos Iônicos, N-alkilação, Caracterização.

Introdução

Propriedades fotofísicas dos compostos derivados do benzimidazol tomaram atenção dos cientistas nas últimas décadas. A intensa luminescência e altos rendimentos quânticos de fluorescência, permitem a aplicação destes compostos como potenciais marcadores ou sensores fluorescentes (Shi *et al.*, 2014). Este trabalho objetiva a síntese e a caracterização de líquidos iônicos derivados de 2-fenilbenzimidazol, com potencial atuação como marcadores ou sensores fluorescentes.

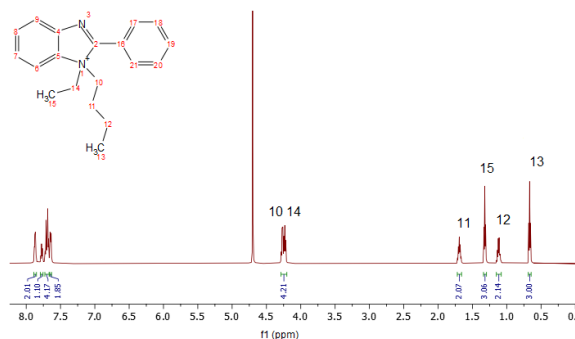
Resultados e discussão

A reação de N-alkilação do 1-etil-2-fenil-1*H*-benzimidazol, a qual leva a formação do produto **2a** foi baseada nos estudos promovidos por Shi *et al.*, 2014 (Shi *et al.*, 2014). No entanto, os autores usaram o brometo de alila, e observaram uma SN2 regioseletiva no nitrogênio-3, isolando o produto **1a** (Figura 1).

Figura 1. Estruturas das moléculas **1a** e **2a**.

Os materiais de partida foram preparados utilizando a metodologia de Y.S. Lee *et al.*, 2015, na qual a ciclização oxidativa de iminas é feita em DMF e H₂O, dispensando o uso de metais e etapas de purificação. A caracterização do produto **2a** foi feita por RMN de ¹H e ¹³C, e experimentos de duas dimensões ¹H-¹³C HMBC, ¹H-¹⁵N HSQC.

A principal evidência da formação da estrutura **2a** foi os multipletos na região entre 4,28 e 4,22 ppm, atribuídos aos hidrogênios 10 e 14 (Figura 1). Os deslocamentos dos multipletos foram similares, e a atribuição correta foi confirmada pelo experimento de HSQC ¹H-¹⁵N.

Figura 2. RMN ¹H **2a** (D₂O, 600 MHz)

Shi *et al.* (Shi *et al.*, 2014) estudaram as propriedades óticas por espectroscopia de absorção UV-vis e emissão de fluorescência dos compostos **1a** em solução aquosa e mostraram que as propriedades não se alteram significativamente com a variação das cadeias alquílicas laterais. Análises prévias indicaram fluorescência no composto **2a**.

Conclusões

De acordo com os dados apresentados, o brometo de 1-butil-1-etil-2-fenil-1*H*-benzimidazol-1-íon (**2a**), é uma molécula promissora para atuar como marcador fluorescente. Além disso, a síntese demonstrou ser regioseletiva com a utilização de bromobutano como alquilante na reação de substituição nucleofílica de segunda ordem.

Agradecimentos

CAPES, CNPQ, FAPERGS, Programa de Pós-Graduação em Química, e a Universidade Federal de Santa Maria.

Referências e notas

- (1) Shi, H., *et al.* (2014), Synthesis and Optical Properties of Novel Fluorescence-Traced Benzimidazolium Bromides, *Journal of Heterocyclic Chemistry*, 51: E71–E76. doi: 10.1002/jhet.1819
- (2) Y.S. Lee, *et al.* Significant facilitation of metal-free aerobic oxidative cyclization of imines with water in synthesis of benzimidazoles *Tetrahedron*, 71 (4) (2015), pp. 532-538, doi: 10.1016/j.tet.2014.12.043

Caracterização espectroscópica de um sistema lipossomal contendo xilana.

Desirée Magalhães dos Santos Costa^{(a)*} (PQ), Alexandre Luiz Parize^(b) (PQ), Gabriel Jorge Sagrera Darelli (PQ)^(c),
Vânia Rodrigues de Lima^(a) (PQ).

magasandes@gmail.com

(a) Escola de Química e Alimentos, Universidade Federal do Rio Grande, Rio Grande, Brasil; (b) Centro de Ciências Físicas e Matemáticas Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil. (c) Universidad de la Republica, Montevideo, Uruguay.

Palavras Chave: lipossomos, xilana, interações moleculares.

Introdução

O câncer de pele não melanoma é o mais predominante no Rio Grande do Sul, caracterizando um grave problema de saúde pública ⁽¹⁾. Neste contexto, a exposição aos raios ultravioletas (UV) é um dos principais fatores de risco, devido ao alto grau de penetração cutânea e formação de radicais livres no interior das células. Uma das formas de prevenção do câncer de pele é o uso de fotoprotetores, tornando-se assim importante o desenvolvimento de formulações e busca por matérias primas eficazes e estáveis frente as suas características físico-químicas. Assim, esse trabalho tem como objetivo a caracterização espectroscópica e estudo das interações moleculares de um sistema nanoestruturado contendo o biopolímero xilana (XL), com fins de obter-se um sistema estável com atividade fotoprotetora

Resultados e discussão

Para a caracterização espectroscópica foram utilizados lipossomos de asolecitina de soja (ASO), contendo o biopolímero XL e as análises foram realizadas através de Infravermelho com transformada de Fourier (FTIR) e Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de ¹H e de ³¹P. **FTIR**- A influência da XL nas regiões polar, interfacial e apolar dos lipossomos foi analisada, através das variações dos estiramentos axiais dos grupos lipídicos obtidas pelo espectro de FTIR (Figura 1). Foi possível observar que a XL não afetou a região apolar lipídica. Entretanto, aumentou a mobilidade molecular na região de interface da membrana, visto que promoveu um aumento na largura do pico de ν C=O em 12,5 cm⁻¹. O biopolímero promoveu um aumento de 11,58 cm⁻¹ no número de onda do estiramento assimétrico do grupo colina (ν_{as} N⁺(CH₃)₃), indicando também uma interação com a região polar lipídica.

¹H RMN- As análises dos valores do tempo de relaxação longitudinal (T₁) demonstraram um aumento discreto de

0,12 s no valor T₁ para hidrogênios presentes a região da colina lipídica com a inserção do biopolímero, reduzindo a mobilidade da primeira.

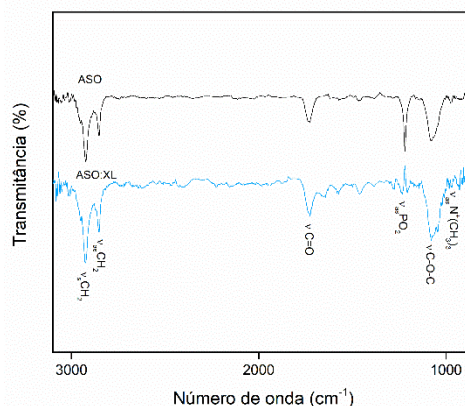


Figura 1. Espectro de FTIR de lipossomos de asolecitina de soja (ASO) na ausência e presença da xilana (XL)

³¹P RMN- Os efeitos da xilana na velocidade de rotação na região do fosfato (polar) foram analisados pela técnica de RMN de ³¹P. Os resultados demonstraram uma redução de 0,8 ppm no valor de anisotropia do deslocamento químico (CSA) do ³¹P, o que indica um aumento de mobilidade rotacional nesta região lipídica.

Conclusões

Os resultados de FTIR e RMN indicaram que o biopolímero XL teve uma maior interação com a região polar dos lipossomos e, ao reduzir a mobilidade dos grupo colina positivamente carregado, pode ser responsável por maior fotoestabilidade do sistema.

Agradecimentos

CIA-FURG

Referencias e notas

BRASIL. Ministério da Saúde. Instituto Nacional do Câncer. Câncer de pele melanoma. [Brasília]: Instituto Nacional do Câncer, 04 jun. 2022.

A Influência da Estação na Energia de Estabilização Intercomponente de [2]Rotaxanos no Estado Sólido Cristalino

Suzan K. Kunz¹ (IC), Fellipe F. S. Farias¹ (PG), Gustavo H. Weimer¹ (PG), Paulo R. S. Salbego² (PQ), Tainára Orlando³ (PQ), Marcos A. P. Martins^{1,*} (PQ)

*E-mail: marcos.nuquimhe@gmail.com

¹Núcleo de Química de Heterociclos (NUQUIMHE), Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), 97105-900 Santa Maria, RS, Brasil. ²Núcleo de Química de Heterociclos (NUQUIMHE), Departamento de Engenharia e Tecnologia Ambiental (DETA), Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), 98400-000 Campus de Frederico Westphalen, RS, Brasil. ³Departamento Acadêmico de Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), 85884-000 Campus de Medianeira, PR, Brasil.

Palavras Chave: Rotaxanos, Interações intercomponente, Estado sólido cristalino, QTAIM.

Introdução

Rotaxanos têm predisposição em aplicações como máquinas moleculares, desde que seus movimentos possam ser controlados. Os [2]rotaxanos mantêm seus componentes, eixo molecular (porção linear que contém a estação e em suas extremidades grupos volumosos) e o macrociclo (porção cíclica), ligados por consequência de suas topologias. A estação é a região que promove as interações intercomponente mais influentes. Buscando investigar a energia de estabilização intercomponente no estado sólido cristalino, estudou-se 4 pares de [2]rotaxanos, a diferença em cada par reside na estação unicamente, fumaramida e succinamida. A metodologia adotada baseou-se em cálculos da Teoria do Funcional de Densidade (DFT), usando dados de difração de raios-X em monocristais. As interações foram quantificadas com base na Teoria Quântica de Átomos em Moléculas (QTAIM). Ainda, foi realizada uma análise de similaridade molecular por meio da sobreposição estrutural dos pares de [2]rotaxanos.

Resultados e discussão

A Figura 1 apresenta os compostos desse trabalho. A partir de cálculos de energia de estabilização intercomponente obtiveram-se os valores dispostos na Tabela 1. Com base nos resultados obtidos através da QTAIM, as interações estação - macrociclo foram majoritariamente classificadas como: $\pi \cdots \pi$ para compostos **a** e $\text{CH} \cdots \pi$ para **b**. Os valores de RMS (*Root Mean Square*) para os pares são inferiores a 0,9, o que demonstra uma alta similaridade estrutural.

Tabela .1 Energia de estabilização intercomponente.

Rotaxano	a (fumaramida) ^a	b (succinamida) ^a
1	-53,73	-52,50
2	-52,50	-61,54
3	-51,70	-50,80
4	-59,55	-63,90

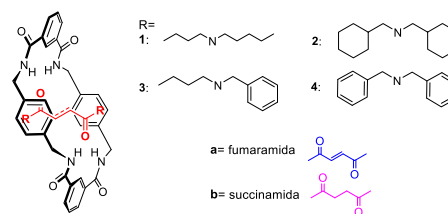
^aValores em kcal mol⁻¹

Figura .1 Pares de [2]rotaxanos desse estudo, o substituinte R é ligado pelo átomo de nitrogênio.

Conclusões

A estação **b** contém uma ligação simples, a qual promove mais liberdade estrutural, levando a mais interações favoráveis entre os componentes do [2]rotaxano que estão presentes no cristal. Ao contrário da estação **a** onde a ligação dupla promove maior rigidez. Conclui-se que entre os pares a pequena diferença estrutural promoveu significativa mudanças energéticas.

Agradecimentos

CNPq, Capes e FAPERGS.

Referências e notas

(1) Quim Nova, **2021**, 41, 76–85; Eur. J. Org. Chem., **2019**, 2019, 3464–3471; J. Mol. Liq. **2023**, 385, 122291.

ESTUDO METODOLÓGICO: REDUÇÃO DE SAIS DE BUNTE VISANDO A OBTENÇÃO DE SULFETOS SIMÉTRICOS E DISSIMÉTRICOS

Vitor Emanuel Simette Zerger (PG)^{1*}, Rogério Aparecido Gariani (PQ)².¹vitor.esz@edu.udesc.br*, ²rogerio.gariani@udesc.br

Palavras Chave: sulfetos dissimétricos, sal de Bunte, dihidropirimidinona.

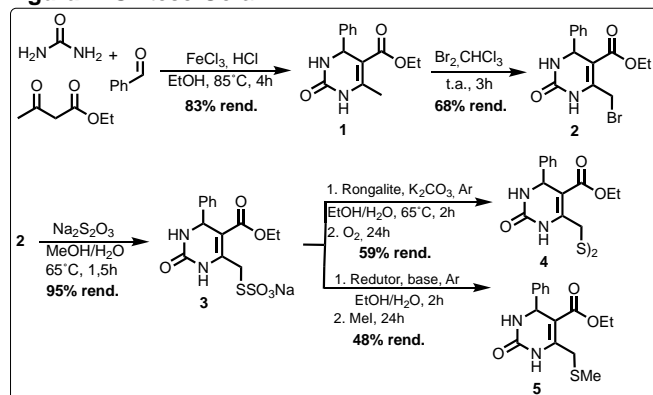
Introdução

A pesquisa sobre compostos organossulfurados revela um grande potencial na área da saúde devido às suas propriedades bioativas e benefícios para a saúde (1). Um grupo específico desses compostos, conhecidos como sais de Bunte, tem despertado interesse como uma alternativa às metodologias convencionais para obtenção de sulfetos, tais como os organometálicos. Os sais de Bunte são sólidos cristalinos, sem odor, de fácil manipulação e não exigem atmosfera inerte. O método mais comum para preparar sais de Bunte envolve a reação entre tiosulfato de sódio ($\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$), e um haleto de alquila (2). Este estudo concentra-se na produção de sulfetos dissimétricos derivados de sais de Bunte, utilizando uma metodologia livre de organometálicos, atmosfera inerte e solventes derivados do petróleo. O principal objetivo é a síntese de sais de Bunte em dihidropirimidinona (DHPM), visando potencializar a atividade biológica já conhecida das DHPMs (3).

Resultados e discussão

O estudo metodológico para preparação das DHPM-Bunte ocorreu em 4 etapas, conforme figura 1.

Figura 1. Síntese Geral.



Primeiro, a DHPM foi obtida em rendimento de 83%, por meio de uma reação de Bignelli catalisada por FeCl_3 . Na

segunda etapa, ocorreu a bromação da DHPM, resultando no composto **2** em 68% de rendimento. Na terceira etapa, o sal de Bunte **3** foi obtido em reação branda e rendimento de 95%. Na etapa final, o dissulfetos simétricos e sulfetos dissimétricos foram sintetizados. O composto **3** foi tratado com rongalite e K_2CO_3 em etanol/água sob atmosfera inerte (Ar). Após 2h, o recipiente de reação foi aberto, resultando no composto **4** em 59% de rend.. Posteriormente, para a formação dos sulfetos dissimétricos, o composto **3** foi novamente tratado com rongalite/ K_2CO_3 em EtOH/ H_2O sob Ar. Após 2h, iodo metano foi adicionado e a reação foi agitada por 24h, obtendo-se o produto **5** em 30 % de rend. Durante a otimização as variáveis, 1) redutor, 2) estequiometria, 3) temperatura, 4) solvente e 5) método de extração, foram avaliadas. Até o momento, o melhor rendimento obtido foi de 48% para o produto **5**. Todos os compostos foram caracterizados por RMN e HRMS.

Conclusões

O estudo da obtenção de sulfetos por meio de sais de Bunte é uma alternativa promissora, eliminando o uso de compostos organometálicos e solventes derivados do petróleo. Como próximos passos, iremos explorar diferentes halletos de alquila e outros eletrófilos, tais como, aceptores de Michael, epóxidos, cloretos de acila e anidridos, para ampliar a gama de compostos e permitir avaliações biológicas mais abrangentes.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPESC, UDESC, SinCa

Referencias e notas

- (1) EI Bcheraoui, C. et al. Journal of the American Medical Association., 319, 1248–1260, 2018
- (2) Wang, M. et al. Aldrichimica Acta, v. 53, p. 19-25, 2020.
- (3) Matos, L. et al. A. European journal of medicinal chemistry, v. 143, p. 1779, 2018.

Síntese de 5-hidroximetilfurfural a partir de frutose catalisada por ácido sulfâmico utilizando radiação de micro-ondas

Vinicius Bertoncillo Molon*¹ (PG) e Thiago Barcellos da Silva¹ (PQ)

*vbmolon@ucs.br. thiago.barcellos@ucs.br

¹ Instituto de Biotecnologia, Universidade de Caxias do Sul, rua Francisco Getúlio Vargas, 1130, Caxias do Sul, RS, Brasil.

Palavras-Chave: 5-hidroximetilfurfural, desidratação, biomassa, bloco de construção, irradiação por micro-ondas, catálise ácida.

Introdução

O 5-HMF é uma molécula considerada importante como plataforma para a produção de diversas moléculas de interesse industrial, a uma síntese eficiente é alvo de grande interesse. A produção do 5-HMF é em geral realizada pela desidratação térmica de açúcares, o qual é facilitada na presença de catalisadores ácidos. No entanto, o processo requer temperaturas elevadas, e por isso, quando métodos de aquecimento convencional são aplicados, tempos longos de reação necessários para uma maior conversão. Porém, com impacto negativo na seletividade, em decorrência da produção de subprodutos como as huminas [1,2].

Neste trabalho, visando uma redução no tempo reacional, e com alta conversão e seletividade para a obtenção do 5-HMF, investigou-se o uso da radiação de micro-ondas como fonte alternativa de energia. O estudo foi realizado na presença do ácido sulfâmico como catalisador e otimizado a partir de um planejamento experimental (DoE) 2³ com ponto central, o que permitiu avaliar os efeitos dos fatores envolvidos no processo.

Resultados e discussão

A partir dos resultados de conversão da frutose e rendimento de 5-HMF obtidos a partir do DoE, notou-se que o fator temperatura, seguido do fator tempo foram os que mais influenciaram na conversão e rendimento. O resultado do DoE indicou a condição reacional de 180 °C, 20 minutos e 10 mol% de catalisador como sendo a mais favorável para uma concentração de 30 g L⁻¹ do substrato frutose. Nestas condições, obteve-se uma conversão de 96,47±0,83% e um rendimento de 76,56±6,52% (Figura 1A).

Adicionalmente, foi explorado o efeito da concentração de frutose para avaliar a escalabilidade do processo. Na concentração de 120 g L⁻¹ de frutose obteve-se uma conversão e rendimento de 91,15±6,98% e 80,34±8,41%, respectivamente, e com um rendimento isolado de 79,7% de 5-HMF com pureza >99% (HPLC) sem a necessidade de purificação (Figura

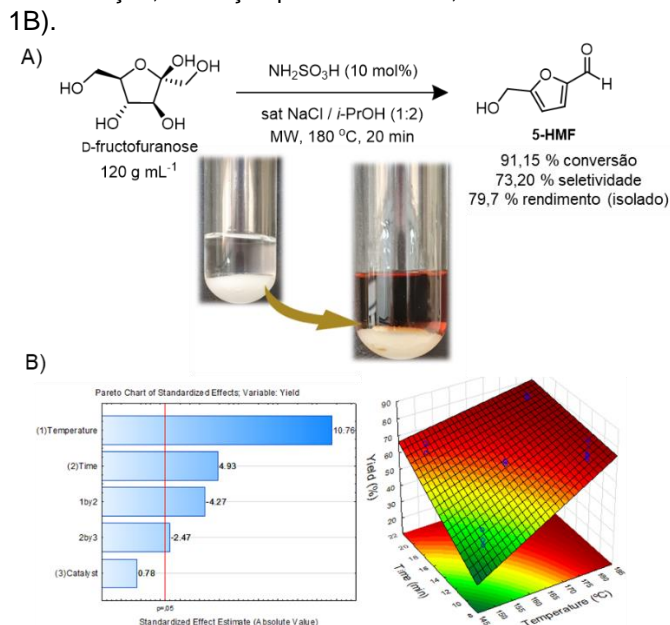


Figura 1. A) Gráfico de Pareto de efeitos padronizados para rendimento de 5-HMF e Gráfico 3D de superfície de resposta B) Síntese de 5-HMF a partir da desidratação da frutose catalisada por ácido sulfâmico.

Conclusões

O planejamento experimental demonstrou-se uma ferramenta eficaz na busca das melhores condições de reações. Além disso, o uso da irradiação de micro-ondas e o ácido sulfâmico possibilitaram tempos curtos de reação evitando a formação de subprodutos, como huminas e contribuindo para maiores valores de conversão, seletividade e rendimento.

Agradecimentos

CNPq, FAPERGS e UCS

Referencias e notas

- (1) F. Chacón- Huete, C. Messina, B. Cigana, P. Forgione. *ChemSusChem*. **2022**, 15, e202200328.
- (2) S. Liu, Y. Zhu, Y. Liao, H. Wang, Q. Liu, L. Ma, C. Wang. *Appl. Energy Combust. Sci.* **2022** 10, 100062.

Síntese de 1,3-tiazolidin-4-ona derivada do 3,5-di-*terc*-butil-4-hidroxibenzaldeído e da 4-amino-antipirina com potencial para captura de radicais livres e analgesia.

Melinda G. Victor^{1*} (PG), Mariana M. M. Coelho¹ (IC), Wilson Cunico¹ (PQ).

E-mail*: melindagv@gmail.com

¹Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Universidade Federal de Pelotas, RS, Brasil.

Palavras Chave: Síntese, Heterociclo, Química Medicinal, Reação Multicomponente, Antioxidante, Analgésico.

Introdução

A hibridização molecular é uma metodologia empregada para obtenção de novos compostos bioativos, com união de farmacóforos. Dentre alguns, os heterociclos têm sido estudados como agentes farmacêuticos. Por exemplo, as 1,3-tiazolidin-4-onas são versáteis com seus múltiplos locais para derivatização, de fácil obtenção e vêm demonstrado variadas bioatividades, como anticâncer, antibacterianas, anti-inflamatórias e antioxidantes. Já os anéis pirazolônicos, presentes em fármacos aprovados demonstraram atividades analgésicas e anti-inflamatórias (1). Exemplos são o difenamizol e o metamizol (dipirona). Portanto, algumas tiazolidin-4-onas derivadas de pirazolonas como a fenazona (antipirina) são possíveis de serem obtidas utilizando a 4-aminoantipirina como precursor. Essa amina demonstrou propriedades importantes biológicas como antimicrobiana e anti-inflamatória (2). Já se tratando de potencial antioxidante, o 3,5-di-*terc*-butil-4-hidroxibenzaldeído é um aldeído similar ao 2,6-di-*terc*-butil-4-metilfenol (BHT), que é um composto fenólico utilizado na preservação de alimentos (3). Logo, a pesquisa buscou sintetizar um composto potencialmente bioativo contendo porções estruturais BHT e pirazolona, através de hibridização molecular.

Resultados e discussão

Foram adicionados para a reação multicomponente em um balão o aldeído análogo ao BHT **1**, a amina análoga a antipirina **2** e o ácido mercaptoacético **3**, respectivamente, e simultaneamente, nas proporções de 1:1:2 (mmol), em refluxo de tolueno (35 mL) e com aparelho Dean-Stark (**Figura 1**). Ao final da reação, se realizou a remoção do solvente em um evaporador rotativo. Em seguida, adicionou-se solução saturada de NaHCO₃, formando um precipitado, a qual foi lavado e filtrado à vácuo. O produto bruto foi purificado através de lavagem a quente com hexano:acetato de etila (9:1).

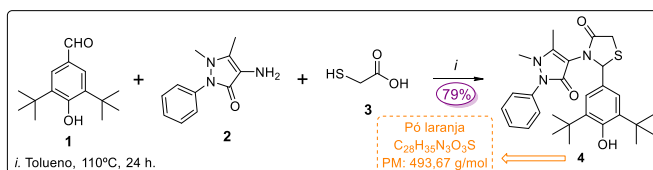


Figura 1. Esquema reacional da síntese da tiazolidinona.

Após purificado, aferiu-se o rendimento do produto **4** e foi realizado sua caracterização por Cromatografia Gasosa acoplada à Espectrometria de Massas (CG-EM) e Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de ¹H e ¹³C, cujos resultados estão dispostos na **Figura 2** e comprovam a formação do heterociclo proposto.

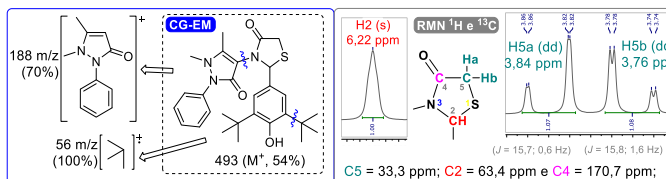


Figura 2. Caracterização da tiazolidinona desejada.

Conclusões

Foi possível a obtenção do heterociclo **4** contendo os dois grupamentos farmacofóricos com rendimento de 79%. Em futuros estudos, será avaliada a sua atividade como analgésico e agente antioxidante.

Agradecimentos

Agradecemos a CAPES, ao CNPq e a FAPERGS.

Referencias e notas

- (1) Seboletswe, P.; Cele, N.; Singh, P. *ChemMedChem*. **2023**, *18*, e202200618.
- (2) Rahman, R. M. A.; Alharbi, A. S.; Alshammari, N. A. *Int. J. Org. Chem*. **2019**, *9*, 85-95.
- (3) Shahidi, F., Ambigaipalan, P. *J. Funct. Foods*. **2015**, *18*, 820-897.

Extração da bixina da semente do urucum e aplicação na papiloscopia

Juliana da Silva Porciúncula^{1*} (IC); Danielle Tapia Bueno¹ (PG); Rayane Martins Braga^{1*} (IC); Amanda Fonseca Leitzke¹ (PG); Gabrielly Quartieri Sejanés¹ (IC); Samuel Alves Pereira¹ (IC); Claudio Martin Pereira de Pereira¹ (PQ)

Universidade Federal de Pelotas – Campus Universitário, S/N – CEP: 96160-000, Capão do Leão, RS – Brasil.

*julianaporciuncula@hotmail.com

Palavras Chave: Bixina; urucum; extração; papiloscopia; impressões digitais.

Introdução

A bixina é extraída do pericarpo da semente da planta denominada urucum (*Bixa orellana* L.), que é originária das regiões da América Central e do Sul.¹ A bixina é um diapocarotenóide de coloração que varia entre o amarelo, o vermelho e o laranja, por sua vez, ela constitui o principal pigmento natural presente na semente de urucum, compreendendo mais de 80% dos carotenóides encontrados nesse material.² A papiloscopia é a ciência que se dedica ao estudo da identificação humana por meio das impressões digitais. Essas impressões são notavelmente únicas para cada indivíduo e servem como uma ferramenta primordial na identificação humana em investigações forenses. Contudo, geralmente são encontradas de forma latente, ou seja, invisíveis a olho nu, sendo assim métodos para a revelação se fazem necessários.³ Nesse sentido, o objetivo deste trabalho é realizar a extração da bixina de sementes de urucum e formular está com compostos com propriedades aderentes para então aplica-los como reveladores de impressões digitais latentes.

Resultados e discussão

Sementes de urucum foram adquiridas no comércio local de Pelotas-RS. A extração foi realizada utilizando as sementes inteiras, temperatura de 60 °C durante 30 min. Os solventes testados foram: acetato de etila, clorofórmio, etanol e metanol.

Devido à intensa coloração da bixina, surgiu o interesse em explorá-la como revelador de impressões digitais devido ao alto contraste que esta pode proporcionar. Com o objetivo de alcançar uma maior aderência a bixina extraída foi formulada com diferentes compostos em diferentes proporções como: dióxido de silício, celulose microcristalina e carboximetilcelulose. As formulações foram testadas como pós revelados de impressões digitais, seguindo metodologia descrita na literatura.⁴ Impressões digitais naturais e sebáceas depositadas em superfície de vidro apresentaram alto contraste e boa aderência conforme é possível observar na figura abaixo.



Figura. Impressões digitais reveladas com a formulação de bixina mais carboximetilcelulose.

Foram conduzidos testes iniciais de extração, e as condições de tempo e temperatura foram mantidas de acordo com a literatura devido ao maior rendimento obtido.⁵ A caracterização da bixina foi efetuada em um cromatógrafo líquido, UHPLC THERMO Ultimate 3000 equipado com detector de ultravioleta-visível e coluna C18. A bixina extraída foi comparada com um padrão da Sigma Aldrich e ambas obtiveram o mesmo tempo de retenção.

Conclusões

A extração bem-sucedida da bixina por meio de um método simplificado é uma inovação promissora para o campo forense, pois utiliza uma biomassa disponível na natureza.

Agradecimentos

UFFPeL, CAPES, FAPERGS, CNPq e INCT Forense.

Referências e notas

- (1) SOUSA, L. S. et al. *Separation and Purification Technology*, v. 168, p. 188–198, 2016.
- (2) NACHTIGALL, A. M. et al. *Food Science and Technology*, v. 29, n. 4, p. 873–878, 2009.
- (3) LEITZKE, A. et al. *Química Nova*, v. 45, n. 4, p. 424–434, 2021.
- (4) PACHECO, B. S. et al. *Chemical Papers*, v. 75, n. 7, p. 3119–3129, 2021.
- (5) MIGUEL, K. B.; CARDOSO, V. L.; REIS, M. H. M. *Waste and Biomass Valorization*, n. 0123456789, 2023.

FeCl₃/TBAB COMO SISTEMA FOTOCATALÍTICO NA OXIDAÇÃO DE TIÓIS A DISSULFETOS, MEDIADA POR LUZ AZULJoão Batista Xavier Moraes¹ (IC)*, Mateus Wagner Rambo¹ (IC), Ricardo Frederico Schumacher¹ (PQ), Filipe Penteadó¹ (PQ),¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria. E-mail: joao.moraes@acad.ufsm.br (JBXM)

Palavras Chave: Fotocatálise, Oxidação, Dissulfetos.

Introdução

A agenda de 2030 estabelece os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) que impacta diretamente as diretrizes de avanços na indústria química. Assim, para o desenvolvimento de processos químicos sustentáveis, a aplicação dos princípios da química verde é de suma importância. Dentre estes princípios, a busca pela eficiência energética (princípio #6) merece destaque, principalmente considerando a busca pelo uso de fontes alternativas de energia com baixas demandas energéticas, como luz visível, através da aplicação de lâmpadas caseiras e LEDs. Estas fontes luminosas vêm se tornando uma ferramenta poderosa em síntese orgânica, pois viabilizam a quebra e formação seletiva de ligações em condições reacionais brandas. Tais processos, em sua maioria dependem de uso de fotocatalisadores para atuarem absorvendo fótons e desencadeando processos de transferências de elétrons. Portanto, o desenvolvimento de sistemas fotocatalíticos utilizando fotocatalisadores baratos e eficientes são bastante desejáveis. Tendo em vista o exposto, o presente trabalho mostra a eficiência do sistema FeCl₃/TBAB como fotocatalisador para promover a oxidação de tióis a dissulfetos, em curtos tempos reacionais e em condições reacionais brandas, utilizando luz azul como fonte alternativa de energia.

Resultados e discussão

Até o presente momento, um estudo de otimização das condições reacionais foi realizado, estudando a influência de diferentes parâmetros reacionais, como o solvente, potência de luz, tempo reacional e quantidade de catalisador. Assim, utilizando MeCN como solvente (1 mL) e 3 mol% do sistema FeCl₃/TBAB, o tiofenol **1** pode ser satisfatoriamente oxidado a dissulfeto **2** em 96% de rendimento, após a solução resultante ser irradiada por luz azul (LED 50W) por 3 horas (Tabela 1).

Tabela 1. Tabela de otimização das condições de reação para a síntese de **2**.^a



#	FeCl ₃	TBAB	Solvente	Rend.
1	5%	5%	MeCN	96%
2	3%	3%	MeCN	96%
3	1%	1%	MeCN	56%
4 ^b	3%	3%	MeCN	80%
5	3%	-	MeCN	N.D.
6	-	3%	MeCN	N.D.
7	3%	3%	THF	87%
8	3%	3%	EtOH	70%

^a Em um frasco reacional foram adicionados tiofenol **1** (0,5 mmol), FeCl₃ (mol%), TBAB (mol%) e solvente (1 mL), sendo a solução resultante irradiada com luz azul (LED, 50W) por 3 horas. Após o término da reação o produto bruto foi purificado por coluna cromatográfica. ^b Reação conduzida por 2 horas. N.D. = não detectado.

Conclusões

Assim, até o presente momento, o sistema catalítico FeCl₃/TBAB vem se mostrando muito eficiente para promover a oxidação de tióis a dissulfetos, abrindo novas oportunidades na química radicalar do átomo de enxofre. Atualmente, um estudo do escopo reacional está sendo realizado, com o objetivo de preparar dissulfeto simétricos e não simétricos, validando a eficiência do método desenvolvido.

Agradecimentos

Trabalho apoiado pelos programas FIPE-UFSM e PIBIC-CNPq. Trabalho financiado pela Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul (FAPERGS) – Projeto ARD 23/2551–0000800-9.

Selenação de 2-fenilimidazo[1,2-a]piridina promovida por luz visível utilizando ácido benzenosselenínico como agente selenilante

Caroline S. Gomes¹ (PG), Carolina A. de Oliveira¹ (IC), João M. Anghinoni¹ (PG), Sabrina S. Ferreira¹ (IC), Filipe Penteado^{2*} (PQ), e Eder J. Lenardão^{1*} (PQ)

¹Laboratório de Síntese Orgânica Limpa - LASOL, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos (CCQFA), Universidade Federal de Pelotas – UFPel, Pelotas, RS, Brasil

² Departamento de Química, Centro de Ciências Naturais e Exatas, Universidade Federal de Santa Maria – UFSM, Santa Maria, RS, Brazil

*E-mail: filipe.penteado@ufsm.br (FP) e lenardao@ufpel.edu.br (EJL)

Palavras-Chave: Imidazopiridina, Ácido benzenosselenínico, Luz visível.

Introdução

Os derivados da imidazo[1,2-a]piridina estão presentes em produtos naturais e também em fármacos, e possuem atividades antibacteriana, anti-inflamatória e antitumoral.¹ Os compostos organoselênio, por sua vez, apresentam atividades farmacológicas, como anticâncer e anti-inflamatória.² Neste contexto, foram desenvolvidas diversas metodologias para a síntese de selanil-imidazopiridinas, algumas delas utilizando reagentes e solventes tóxicos e condições de reação severas. Além disso, em geral há formação de resíduos tóxicos ou de difícil separação.³ Relatamos aqui os resultados parciais na síntese de 3-selanil-imidazopiridina **3** através da reação entre 2-fenilimidazo[1,2-a]piridina **1** e ácido benzenosselenínico (BSA) **2** sob luz visível.

Resultados e discussão

A fim de determinar a melhor condição reacional para a síntese de 3-selanilimidazopiridina, foi realizado um estudo de otimização das condições reacionais (Tabela 1). Após nossos estudos (variação de solvente, fonte e cor da luz, presença ou não de inibidor radicalar ou atmosfera inerte), a melhor condição reacional foi estabelecida após a irradiação de uma solução dos reagentes **1** e **2** (2 equiv) em AcOEt com LED azul (30 W) por 6 h, fornecendo o produto **3** em 82% de rendimento (Tabela 1, entrada 12).

Tabela 1. Otimização das condições reacionais.^a

#	2a (mmol)	Solvente	LED (W)	tempo (h)	Rend (%)
1	0,5	MeCN	Azul (50)	4	47
2	0,5	DMSO	Azul (50)	4	57
3	0,5	DMF	Azul (50)	4	48
4	0,5	AcOEt	Azul (50)	4	62
5	0,5	Acetona	Azul (50)	4	NF
6	0,5	1,4-dioxano	Azul (50)	4	35

7	0,5	EtOH	Azul (50)	4	60
8	0,5	H2O	Azul (50)	4	NF
9	0,5	AcOEt	Verde (70)	4	42
10	0,5	AcOEt	Branco (50)	4	54
11 ^b	0,5	AcOEt	Azul (50)	4	65
12	0,5	AcOEt	Azul (30)	6	82
13	0,5	AcOEt	Azul (20)	6	65
14	0,75	AcOEt	Azul (20)	6	67
15 ^c	0,5	AcOEt	Azul (30)	6	52
16	0,5	AcOEt	Escuro	6	10
17 ^d	0,5	AcOEt	Azul (50)	6	68
8 ^e	0,5	AcOEt	Azul (50)	6	71

^a Uma mistura de 2-fenilimidazo[1,2-a]piridina **1** (0,25 mmol) e BSA **2** no respectivo solvente (2,0 mL) foi agitada sob irradiação de luz visível. O produto **3** foi purificado por cromatografia em coluna.^b A reação foi realizada sob atmosfera de O₂.^c A reação foi realizada sob atmosfera de Ar.^d Foi adicionado o inibidor radicalar TEMPO.^e Foi adicionado o inibidor radicalar hidroquinona. NF: não formou produto.

Conclusões

Foi possível determinar a melhor condição reacional para a síntese da 3-selanil-imidazopiridina **3** através da selenação da 2-fenilimidazo[1,2-a]piridina **1** usando ácido benzenosselenínico como fonte e selênio. A reação foi promovida por luz visível, uma fonte alternativa de energia e os subprodutos formados são água e disselênio de difenila, que pode ser reutilizado. Como perspectivas futuras, será realizado um estudo do escopo da reação, testando diferentes substituintes em ambos os substratos.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq, FAPERGS, CAPES e FINEP.

Referências e notas

- (1) (a) Kaminsky, J. J.; Doweiko, A. M. *J. Med. Chem.* **1999**, *40*, 427. (b) Fisher, M. H.; Lusi, A. *J. Med. Chem.* **1972**, *15*, 982. (c) Rival, Y.; Grassy, G.; Taudou, A.; Ecalte, R. *Eur. J. Med. Chem.* **1991**, *26*, 13.
- (2) (a) Lenardão, E. J.; Santi, C.; Sancineto, L. *New Frontiers in Organoselenium Compounds*. Springer: Cham, 2018. (b) Kuršvietienė, L.; et al *Antioxidants* **2020**, *9*, 80. (c) Pinz, M. et al *Eur. J. Pharma.* **2016**, *780*, 122.
- (3) (a) Kondo, K. et al *Synthesis* **2018**, *50*, 2200. (b) Zhong, Z. et al *ChemistrySelect* **2022**, e202204176. (c) Anghinoni, J. M. et al *New J. Chem.* **2023**, *47*, 6066.

Influência da luz na produção de fenólicos em kombucha de erva-mate (*Ilex paraguariensis*)

Suelen Santos da Silva^{1*}(PG), Agenor Hentz Da Silva Junior²(PQ), Patrícia Poletto²(PQ), Tiago Elias A. Frizon²(PQ), Roberta Bussamara Rodrigues¹(PQ). [*suelenssilva090609@gmail.com](mailto:suelenssilva090609@gmail.com)

¹Universidade Federal do Rio Grande do Sul

²Universidade Federal de Santa Catarina

Palavras-Chave: Kombucha, Erva-mate, Fenólicos, Antioxidante

Introdução

A procura por alimentos saudáveis, com propriedades probióticas e prebióticas tem aumentado nos últimos anos. A kombucha é uma bebida com ambas propriedades e é feita originalmente a partir da fermentação da *Camellia sinensis* por uma colônia simbiótica de fungos e bactérias¹. Essa fermentação resulta em aumento dos ácidos orgânicos, tais como acético, láctico, glucônico, glucurônico e fólico, também aminoácidos, enzimas e vitaminas quando a kombucha é produzida com erva-mate². Os ácidos cafeoilquínicos são os principais compostos fenólicos também presentes na kombucha de erva-mate e são responsáveis pelas atividades antioxidantes e antimicrobianas³. No presente estudo, foi avaliada a influência da exposição à luz na produção de fenólicos nas kombuchas de erva-mate (Figura 1) em diferentes tempos de fermentação.

Resultados e discussão

Kombuchas de erva-mate, tanto as expostas à luz quanto as que ficaram ao abrigo da luz (Figura 1), foram preparadas em triplicata, com 12g de erva-mate, 10% de sacarose (m/v) e um chá de arranque (starter) 10% (v/v), que é uma kombucha de chá verde. Foram avaliados os parâmetros: concentração de fenólicos totais, teor de sólidos solúveis, pH e perfil dos compostos orgânicos por FT-IR (Figura 2), nos tempos de fermentação de 0, 7, 14 e 21 dias (Tabela 1).

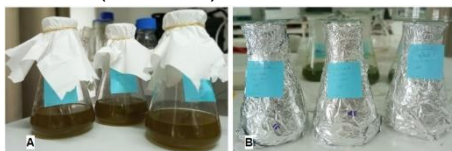


Figura 1. Kombuchas de erva-mate. A) exposta à luz; B) ao abrigo da luz.

Durante o processo de fermentação, observou-se que o teor de fenólicos, inicialmente, diminuiu e, no 21º dia, voltou a aumentar. Esse fato deve-se a liberação de catequinas presentes nas células microbianas sensíveis ao meio ácido e a ação de enzimas ainda não identificadas. Estas enzimas propiciaram a hidrólise de

cadeias longas de polifenóis produzindo novas moléculas que contribuíram para o aumento da concentração de fenólicos totais (Figura 2 e Tabela 1).

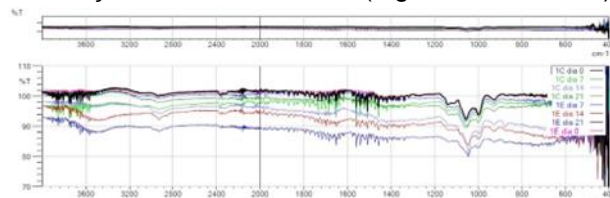


Figura 2. Espectro FT-IR das kombuchas de erva-mate expostas à luz (C) e ao abrigo da luz (E), nos dias 0, 7, 14 e 21.

Tabela 1. Resultados dos parâmetros avaliados das kombuchas de erva-mate.

Dia	Exposta à luz			
	0	7	14	21
pH	5,68±0,03	3,40±0,26	2,97± 0,14	2,87±0,12
°Brix	11º±0	11º±0	10º±1,0	10º±0
F.T.*	6,24±0,16	6,82±0,86	2,93±0,43	5,30±0,36
Dia	Ao abrigo da luz			
	0	7	14	21
pH	5,67±0,05	3,82±0,27	3,05± 0,20	2,86±0,16
°Brix	11º±0	10,3º±0,6	10º±0	10º±0
F.T.*	6,77±0,22	5,57±0,20	3,17±0,23	5,93±0,64

*F.T.: Fenólicos Totais, expressos em mg EAG/g.

Conclusões

Assim como a kombucha de chá verde, a kombucha de erva-mate tem uma quantidade considerável de compostos fenólicos. De acordo com os resultados apontados neste trabalho, os fenólicos são encontrados em maior quantidade quando a kombucha foi produzida ao abrigo da luz.

Agradecimentos

LMA da UFSC-ARA e LAPROMAQ da UFRGS.

Referencias e notas

- (1) Tapias, Y. A. R.; Di Monte, M. V.; Peltzer, M. A.; Salvay, A. G. *Carbohydrate Polymer Technologies and Applications*, vol. 5, **2023**
- (2) Lopes, D.R.; Santos, L.O.; Prentice-Hernández, C. *J. Food Process. Preserv.* **2021**, 45, e15101.
- (3) Martín J. G. P.; Porto, E.; de Alencar, S. M.; da Glória, E. M.; Corrêa, C. B.; Cabral I. S. R. *Rev Argent Microbiol.* **2013** Apr-Jun;45(2):93-8.

Preparação, Caracterização e Aplicação em Reação de Acoplamento Suzuki-Miyaura de um Novo Catalisador de Paládio Estabilizado por Polihexametileno Biguanida (PHMB)

Marcella de O. Moura (IC)*, Mateus Henrique Keller (PG) e Bruno Silveira de Souza (PQ).

Marcella.moura@grad.ufsc.br

Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC).

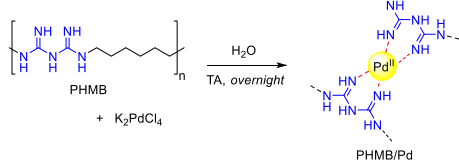
Palavras Chaves: Biguanida, Acoplamento Cruzado, Reação de Suzuki, Catálise, Química Verde.

Introdução

O desenvolvimento de catalisadores com foco no incremento da atividade catalítica é largamente explorado. No entanto, estudos que levam em conta o uso de solventes de baixa toxicidade e que foquem na fácil recuperação do catalisador metálico são comparativamente menos explorados na literatura. Visto que catalisadores poliméricos contendo Pd são de extrema eficácia em reações de Suzuki-Miyaura (SM),¹ a proposta desse trabalho foi a preparação de um material baseado em polímero comercial e que apresente eficiência catalítica ao longo de vários ciclos reacionais.

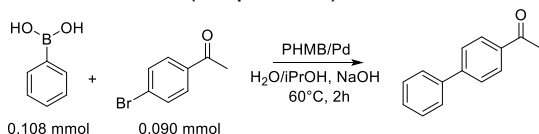
Resultados e discussão

A preparação do catalisador consiste em gotejar uma solução de sal de Pd²⁺ sobre uma solução do polímero PHMB. Após 24h de agitação, um precipitado é formado (PHMB/Pd), o qual é purificado por excessivas etapas de lavagem (Esquema 1).



Esquema 1. Representação da conversão do PHMB em PHMB/Pd.

A atividade do material foi avaliada na reação de SM em mistura de água e isopropanol em experimentos em batelada. Utilizou-se 7,3 mol % de Pd em relação ao reagente limitante, a 4-bromoacetofenona (Esquema 2).



Esquema 2. Reação de ácido fenilborônico e 4-bromoacetofenona para resultado em produto SM.

A reação foi monitorada via medidas de absorção na região UV-Vis (Figura 1). Observa-se que ocorre o aumento da banda em 283 nm e diminuição da banda em 255 nm ao longo do tempo, bandas relativas ao produto SM e ao reagente 4-bromoacetofenona, respectivamente.

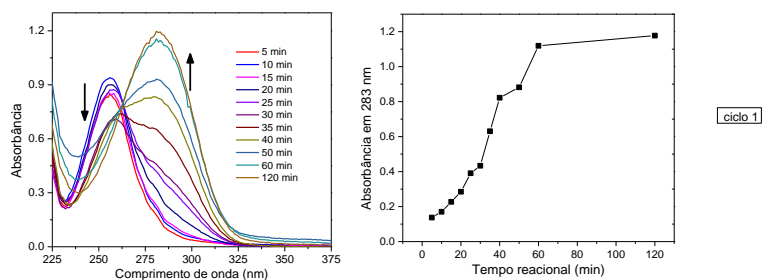


Figura 1. Espectro de absorção ao longo da reação (esquerda) e curva de absorção em 283 nm em função do tempo (direita).

A eficiência da conversão do produto foi avaliada em diversos ciclos reacionais após remoção de sobrenadante por centrifugação e lavagem do catalisador. Notou-se atividade catalítica com conversão quantitativa do reagente limitante em produto mesmo após o 6º ciclo reacional.

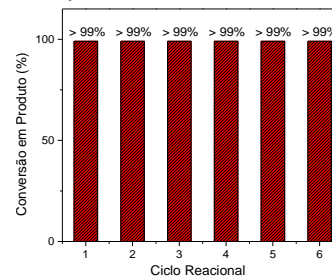


Figura 2. Conversão de produto SM determinada por RMN de ¹H ao longo dos ciclos reacionais.

Conclusões

Propôs-se metodologia de preparo de um material utilizando polímero de fonte comercial, o qual apresenta atividade catalítica em reações SM em solvente verde e sendo passível de reutilização.

Agradecimentos

Ao CNPq pelo auxílio financeiro.

Referências e notas

(1). Nishida, Elvis N., et al. ChemCatChem 14.5 (2022): e202101596.

O Papel das Interações Estabilizadoras e Desestabilizadoras na Formação da Rede Cristalina de Sais de Amônio

Gustavo H. Weimer¹ (PG), Tainára Orlando² (PQ), Paulo R. S. Salbego³ (PQ), Marcos A. P. Martins^{1*} (PQ)

e-mail: marcos.nuquimhe@gmail.com

¹Núcleo de Química de Heterociclos (NUQUIMHE), Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), 97105-900 Santa Maria, RS, Brasil. ²Departamento Acadêmico de Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), 85884-000 Campus de Medianeira, PR, Brasil. ³Núcleo de Química de Heterociclos (NUQUIMHE), Departamento de Engenharia e Tecnologia Ambiental (DETA), Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), 98400-000 Campus de Frederico Westphalen, RS, Brasil.

Palavras Chave: Engenharia de cristais, Haletos de amônio, Cluster supramolecular, Mecanismos de cristalização.

Introdução

O estudo da arquitetura supramolecular de novos materiais baseados em diferentes interações intermoleculares é de constante interesse nas mais diversas áreas. Os estudos voltados à engenharia de cristais envolvendo a organização cristalina de sais orgânicos têm sido amplamente discutida envolvendo *synthons* e *motifs*, podendo vir a negligenciar outras interações intermoleculares mais fracas que interações de hidrogênio.¹ Este estudo emprega moléculas carregadas aplicando a ferramenta de demarcação do cluster supramolecular, no qual posteriormente, pode se propor mecanismos de cristalização para estas estruturas, considerando as interações estabilizadoras e desestabilizadoras no sistema cristalino.²

Resultados e discussão

O presente trabalho avaliou 27 estruturas de Haletos de *mono-*, *di-*, *tri-* e *tetra-*alquilamônio do banco de dados de estruturas (CCDC).³ Aqui, como exemplo, serão descritas duas, Brometo de Dimetilamônio (**1**) e Brometo de Tetrakis(decil)amônio (**2**). Após a construção dos clusters supramoleculares com o auxílio das ferramentas ToposPro e Gaussian 09, obtiveram-se os dados de área de contato e energia de estabilização das respectivas redes cristalinas (Figura 1).

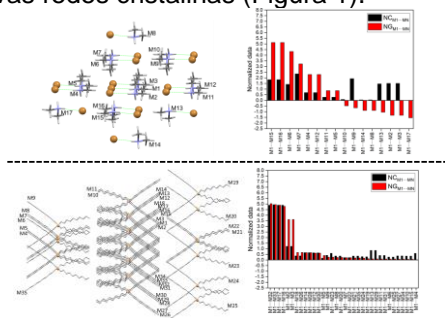


Figura 1. Cluster Supramolecular, área de contato e energia de estabilização para os compostos **1** e **2**.

Observou-se que os dímeros com maior energia de estabilização apresentam o ânion haleto compartilhado

com o hidrogênio da ligação N-H. Contudo, os pares de moléculas mais desestabilizadoras exibem o ânion haleto na mesma direção. Além disso, observou-se que quanto maior a cadeia carbônica ligada ao cátion, há maior minimização das repulsões entre as moléculas presentes na rede cristalina. Os mecanismos de cristalização propostos para as estruturas foram similares, visto que as altas energias estabilizadoras compensam os valores desestabilizadores da rede cristalina (Figura 2).

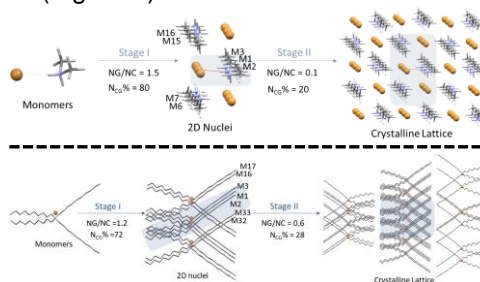


Figura 2. Mecanismos de cristalização para os compostos **1** e **2**. Hidrogênios omitidos para melhor visualização.

Conclusões

Dessa forma, pode-se concluir que sais de amônio com grandes grupos alquilas levam a um comportamento supramolecular do tipo *salt-without-charge*. No entanto, a ausência de cadeias de carbono no nitrogênio e/ou a presença de NH leva a um comportamento supramolecular do tipo *salt-with-charge*.

Agradecimentos

Capes, CNPq e FAPERGS.

Referências e notas

- (1) Cryst. Growth Des. 2003, **3** (4), 567–571.
- (2) RSC Adv. 2014, **4** (84), 44337–44349.
- (3) CrystEngComm, 2022, **24**, 7039-7048

Síntese de análogos da Tacrina contendo selênio

Ariana Silveira Lima (PG)^{a*}, Manoela do Sacramento (PG)^a, Gabriel Pereira da Costa (PG)^a, Diego Alves (PQ)^a

^a Laboratório de Síntese Orgânica Limpa (LaSOL), UFPel, Pelotas, Brasil.

*E-mail correspondente: arianallima@hotmail.com

Palavras-Chave: Fármacos, Selênio, Alzheimer.

Introdução

No desenvolvimento de novos fármacos, como a síntese de moléculas que possuam dois ou mais grupos funcionais diferentes é importante especificar os perfis biológicos, para que o novo fármaco seja mais eficaz. Nessa linha, a introdução de átomos de selênio na síntese de novas moléculas tem se tornado cada vez mais crescente,¹ visto as diversas e potentes atividades farmacológicas que essas moléculas podem apresentar, tais como anticarcinogênica, antidepressiva, anti-inflamatória e antioxidante.² Por outro lado, mesmo apresentando efeitos colaterais, a Tacrina foi o primeiro fármaco a ser utilizado para tratar a doença de Alzheimer, em 1993, demonstrando uma inibição reversível da ação central da acetilcolinesterase (AChE).³ Nesse sentido, levando em conta a importância de se modificar a estrutura de fármacos e a importância de se agregar selênio em novas moléculas, se torna interessante a síntese de derivados da Tacrina contendo selênio, sendo possível torna-la mais eficaz e com efeitos colaterais reduzidos.

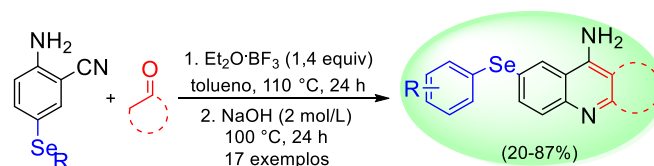
Resultados e discussão

Inicialmente, a síntese de 2-aminobenzonitrilas contendo uma porção orgânica de selênio foi realizada por meio de método adaptado da literatura.⁴ Com essa metodologia, foram obtidos dezesseis compostos contendo substituintes arila, butila e naftila, ligados à porção derivada do disseleneto de diorganila, em bons rendimentos (40 – 90%) (Esquema 1).



Esquema 1: Síntese de 2-aminobenzonitrilas contendo selênio.

Posteriormente, esses compostos foram utilizados como substratos na reação com cetonas cíclicas, na presença de 1,4 equivalentes de trifluoroboroetato como ácido de Lewis, para a síntese de análogos selenados da Tacrina (Esquema 2).



R = arila, butila, naftila

Esquema 2: Síntese de análogos da Tacrina contendo selênio.

Conclusões

Os produtos desejados foram obtidos em rendimentos de 20% a 87%. Os compostos sintetizados foram avaliados *in silico*, demonstrando serem potentes inibidores da AChE, além disso, o composto sintetizado derivado do disseleneto de difenila está sendo testado *in vitro* e *in vivo* contra a doença de Alzheimer.

Agradecimentos

Agradecemos ao LaSOL, CNPq, CAPES, FAPERGS e a UFPEL.

Referências e notas

- (1) Alberto, E. E.; Braga A. L. *Selenium and Tellurium Chemistry – From Small Molecules to Biomolecules and Materials*, first ed., Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin, **2011**.
- (2) (a) Iwaoka, M. *Antioxidant Organoselenium Molecules, in Organoselenium Chemistry: Between Synthesis and Biochemistry* Bentham Science, Benthan e-Books, **2014**. (b) Nogueira, C. W.; Zeni, G.; Rocha, J. B. T. *Chem. Rev.* **2004**, 104, 6255.
- (3) Davis; L. K.; Powchik P. *Lancet*, **1995**, 345, 625.
- (4) Saba, S.; Rafique, J.; Braga, A. L. *Catal. Sci. Technol.* **2016**, 6, 3087.

Síntese de Cristais Líquidos Curvados Derivados da Dibenzalacetona

Manuela Santos Corrêa^{1*} (IC), Monike da Silva Kutz^{1,2} (PG), Matheus Julian Cruz Gomes³ (PG) Gustavo Sérgio dos Santos¹ (PG), Eduard Westphal^{1*} (PQ). *manuela.santos@grad.ufsc.br; eduard.w@ufsc.br¹Universidade Federal de Santa Catarina, Departamento de Química, Florianópolis, Santa Catarina, Brasil, 88040-900.²Centre de Recherche Paul Pascal (CNRS/Université de Bordeaux), Pessac, França, 33600.³Departamento Acadêmico de Química e Biologia, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, Brasil.

Palavras-chave: Cristais líquidos curvados, química orgânica, dibenzalacetona.

Introdução

Cristais líquidos (CLs) são materiais dinâmicos auto-organizáveis pertencentes ao quarto estado da matéria, com propriedades físicas que se mostram intermediárias à fase líquida e ao sólido cristalino. Atualmente, essa classe de materiais vem sendo estudada com um amplo foco para a aplicação em novas tecnologias, tais como no desenvolvimento de displays de OLEDs, sensores, células solares, entre outros. Com isso, o foco deste projeto é o estudo dos cristais líquidos curvados, por apresentarem atributos únicos decorrentes do seu eixo de curvatura.⁽¹⁾ Nesse trabalho, o centro (1*E*,4*E*)-1,5-bis(4-hidroxifenil)penta-1,4-dien-3-ona (Figura 1) está sendo empregado para o preparo de diferentes moléculas que se diferenciam pelos grupos conectores e extensão molecular. O centro escolhido se destaca pela curvatura ideal, pelo forte momento de dipolo transversal gerado pela carbonila (C=O) e por não ser um centro não aromático, diferindo do que é comumente empregado nesses materiais curvados.⁽²⁾

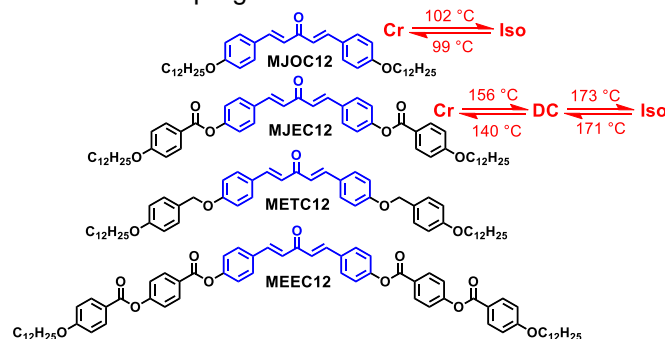


Figura 1: Representação das estruturas curvadas baseadas na Dibenzalacetona (em azul) exploradas nesse trabalho, bem como temperaturas de transição (vermelho) dos produtos já obtidos.

Resultados e discussões

O centro curvado foi obtido pela dupla condensação aldólica entre o 4-hidroxibenzaldeído e a acetona e em meio ácido. Os braços foram preparados em paralelo e conectados através de reações de

alquilação ou esterificação. Os produtos MJOC12 e MJEC12 já foram obtidos e caracterizados, enquanto METC12 e MEEC12 estão sendo produzidos. Os braços são obtidos com bons rendimentos, enquanto dificuldades são encontradas na obtenção dos produtos.

Os produtos apresentam boa estabilidade térmica. Investigações por Microscopia Óptica com Luz Polarizada (MOLP) e Calorimetria Diferencial de Varredura (DSC) mostraram que o produto MJOC12 não apresentou comportamento líquido-cristalino, enquanto o MJEC12 apresentou mesomorfismo do tipo conglomerado escuro (DC), conforme sugerido pelas texturas observadas e pelo padrão lamelar determinado por Difractometria de Raios X (XRD) com temperatura variada.

Conclusões

A partir das moléculas preparadas até o momento, observa-se que o centro curvado derivado da dibenzalacetona apresenta-se promissor para obtenção de cristais líquidos com forte momento de dipolo lateral, porém que um comprimento molecular mínimo se faz necessário. Modificações estruturais na anisometria molecular e nos grupos conectores estão em andamento para explorar melhor a capacidade do centro curvado.

Agradecimentos

UFSC, UTFPR, CNPQ, INEO, INCT catálise, GPM3.

Referências e notas

- (1) GOODBY J. W., COLLINGS P. J., KATO T., TSCHIERKE C., GLEESON H. F., RAYNES P. **Handbook of Liquid Crystals**, 2nd ed.; Wiley VCH (2014).
- (2) WESTPHAL, E. **Síntese de Cristais Líquidos Funcionalizados Contendo o Heterociclo 1,3,4-oxadiazol**. Florianópolis, 2014

Avaliação da atividade antifúngica do eugenol covalentemente ligado ao Líquido Iônico brometo de 4-bromobutil(3-metilimidazol-1-ium) após síntese e caracterização.

*Bruno Stona Cassol dos Santos¹(IC), Victor dos Santos Pereira¹(PG), Thaíssa Silva Beck¹(PG), Letícia Zibetti¹(PG), Amanda Carginin de Moraes¹(IC), Caroline Raquel Bender¹(PQ), Clarissa Piccinin Frizzo¹(PQ).
*stona.santos@acad.ufsm.br

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria

Palavras Chave: Líquidos Iônicos, Compostos aromáticos, antifúngico, propriedades.

Introdução

Líquidos Iônicos (LIs) são sais orgânicos constituídos exclusivamente por íons. Dentre as diversas propriedades, uma das mais relevantes é a possibilidade de ajustar suas propriedades físico-químicas escolhendo uma combinação cátion-ânion adequada, possibilitando a modulação da estrutura de acordo com o interesse desejado.¹ O eugenol, principal constituinte do cravo da Índia tem sido amplamente utilizado como antifúngico e antisséptico tópico. Sua ação consiste na inibição do crescimento e na destruição das células dos fungos, tornando-o uma escolha popular em tratamentos tópicos e orais. Entretanto a baixa solubilidade desse fármaco em alguns solventes comumente empregados na formulação de medicamentos é um problema, podendo afetar a biodisponibilidade e a eficiência terapêutica, demandando dosagens elevadas e prolongadas, aumentando o risco de efeitos colaterais indesejados.² Desta forma, o objetivo do presente trabalho se baseia na inserção do LI [But(MIM)Br][Br] na estrutura do eugenol e avaliar as alterações nas suas propriedades físico-químicas para o uso como antifúngico.

Resultados e discussão

O [EugeB(MIM)][Br] foi sintetizado utilizando eugenol comercial, LI [But(MIM)Br][Br] e KOH. A caracterização química (RMN de ¹H e ¹³C), a caracterização térmica (TGA e DSC), as propriedades físicas (solubilidade e densidade) e a atividade antifúngica foram prosseguidas. Conforme demonstrado na **Tabela 1**, foi observado que para o novo produto sintetizado houve um excelente ganho de estabilidade térmica (165 °C), em relação ao eugenol puro. Além disso cabe destacar que a inserção do LI [But(MIM)Br][Br] na estrutura do eugenol alterou drasticamente a sua solubilidade em solventes polares próticos (água e etanol).

Tabela 1. Propriedades físicas e caracterização térmica dos compostos estudados.

Avaliações	Eugenol	[EugeB(MIM)][Br]
Solubilidade em H₂O	Não	Sim
Densidade (g cm³)	1,015 ± 0,02	1,345 ± 0,02
T_d^a (° C)	131	296
T_p^b (° C)	-7.5	168,5
Aparência	Líquido viscoso amarelo	Líquido viscoso castanho

^a Temperatura de decomposição (TGA)

^b Temperatura de fusão (DSC)

Para a avaliação antifúngica foram testados 5 dermatófitos e 6 leveduras. Os resultados para esta avaliação se mostraram promissores, tendo em vista que o [EugeB(MIM)][Br] inibiu o crescimento fúngico em concentrações muito menores que o seu material de partida (eugenol) para todos os fungos testados, cabendo destacar que para a levedura *Cândida dubliniensis* o novo composto sintetizado se mostrou 16 vezes mais potente que o eugenol.

Conclusões

Rendimentos superiores a 90% foram alcançados utilizando esta rota sintética. Após avaliação das propriedades foi demonstrada a capacidade do LI de melhorar a propriedade física das estruturas químicas. Após avaliação antifúngica foi observado que o [EugeB(MIM)][Br] apresentou uma potente ação antifúngica, superior a observada para o eugenol.

Agradecimentos

À UFSM, FAPERGS, CNPq e CAPES.

Referências e notas

- (1) Hallett, J. P., and Welton, T. Chem. rev. **2011**, 111, 3508-3576.
- (2) Carrasco, H., et al. Molecules. **2012**, 17, 1002-1024.

Síntese regioselectiva de 2-azida-4-aryl-6-(trifluorometil)pirimidina utilizando meio reacional básico

Fernanda Piecha Ludwig*¹(PG), Morilo Aquino Delevati¹(PG), Guilherme Carvalho Asoo¹(IC), José Eduardo Avila Toledo¹(IC), Adriana Machado das Neves¹(PQ), Alex Fabiani Claro Flores¹(PQ)

¹Escola de Química e Alimentos - FURG; E-mail:fernandaludwig95@gmail.com

Palavras-Chave: Heterociclos, azido-pirimidinas, 5-aminotetrazol

Introdução

Compostos heterocíclicos nitrogenados tem se destacado por apresentar atividades biológicas e tecnológicas de vasto interesse¹. Tetrazóis podem apresentar tautomerismo deslocando-se o equilíbrio no sentido de formação azida/tetrazol². Com o objetivo de buscar a versatilidade sintética e procurando investigar o equilíbrio azida-tetrazol, este trabalho descreve um estudo da reatividade do 1-*H*-5-aminotetrazol frente a 1,1,1-trifluor-4-metóxi-4-arylbut-3-en-2-ona, para a formação da 2-azido-pirimidina ou tetrazolo[1,5-*a*]pirimidina correspondente e elucidação estrutural dos compostos heterocíclicos obtidos.

Resultados e discussão

A formação do heterociclo esperado ocorreu na presença de trietilamina como catalisador básico, em etanol sob irradiação em micro-ondas por 15 minutos, com 86% de rendimento. O composto obtido na forma de monocrystal foi caracterizado através de RMN de ¹H/¹³C. Com análise de difratometria de Raios X, evidenciou-se a formação de 2-azida-4-aryl-6-(trifluorometil) pirimidina, conforme figura 1.

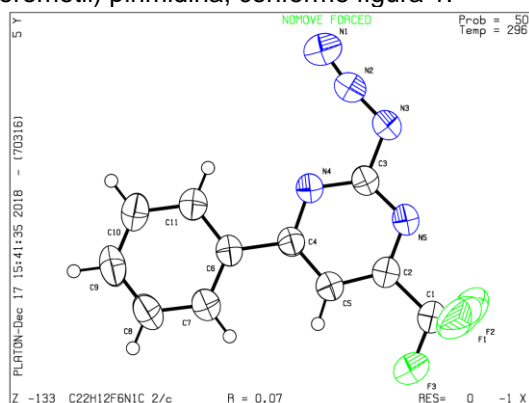


Figura 1. Projeção da estrutura molecular do composto. Probabilidade dos elipsoides: 50%.

Com análises de Espectroscopia de Infravermelho confirmou-se, mais uma vez, a forma tautomérica azida pela presença de uma banda de absorção em torno de 2125-2158 cm^{-1} . Com a utilização de meio reacional básico observou-se a formação apenas da forma tautomérica azida.

Conclusões

O composto foi obtido de forma pura com bom rendimento, com régio-especificidade e seletividade, possibilitando uma futura derivatização da azida para triazol, através de reações do tipo *Click*. Além disso, a reação transcorreu de maneira *eco-friendly*, atingindo objetivos atuais de síntese orgânica.

Agradecimentos

Órgão de Fomento: CAPES
CIA-Centro Integrado de Análises (FURG)
Universidade Federal de Santa Maria (UFSM)

Referencias e notas

- (1) (a) Santoso, K.T., Brett, M.W., Cheung, C.-Y., Cook, G.M., Stocker, B.L., and Timmer, M.S.M., *Chemistry Select*, **2020**, 5, 4347, (b) Kun, S., Bokor, E., Sipos, A., Docsa, T., Somsák, L., *Molecules*, **2018**, 23, 666. (c) Mallo-Abreu, A., Pietro-Díaz, R., Jaspers, W., Azuaje, J., Majellaro, M., Velando, C., García-Mera, X., Caamaño, O., Brea, J., Loza, M.I., Gutiérrez-de-Terán, H., Sotelo, E., *J. Med. Chem.*, **2020**, 63, 7721.
- (2) (a) Abu-Eittah, R. H.; El-Kelany, K. E. A. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. **2012**, 99, 316. (b) Pleshkova, N.V., Nikolaenkova, E.B., Krivopalov, V.P., Mamatyuk, V.I., *Russ. Chem. Bull.* **2017**, 66, 2095. (c) Nikolaenkova, E.B., Aleksandrova, N.V., Mama-tyuk, V.I., Krivopalov, V.P., *Russ. Chem. Bull.*, **2018**, 67, 893. (d) Ludwig, F. P.; Delevati, M. A.; Cargnelutti, R.; Cervo, R.; Vicenti, J. R. M.; Flores, D. C.; Flores, A. F. C. *Russian Journal of Organic Chemistry*, **2023**, 59, 1, 164–173. (e) Sirakanyan S. N.; Spinelli D.; Geronikaki A.; Hovakimyan A. A.; Noravyan A.S. *Tetrahedron*. **2014**.

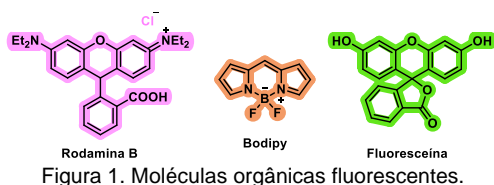
Síntese de derivados da fluoresceína contendo selênio utilizando ácido benzenosselenínico

Kethelyn M. Rosa¹ (PG), Nicole M. Washio¹ (IC), Eder J. Lenardão^{1*} (PQ)¹Laboratório de Síntese Orgânica Limpa - LASOL, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos (CCQFA), Universidade Federal de Pelotas – UFPel, Pelotas, RS, Brasil. *E-mail: lenardao@ufpel.edu.br (EJL)

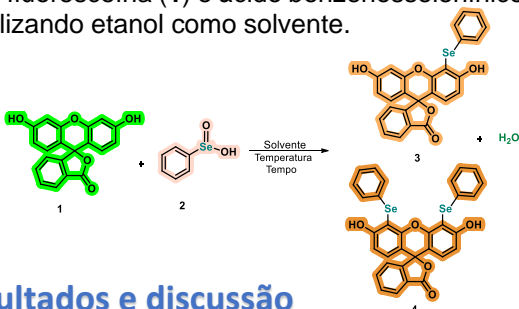
Palavras-Chave: Fluoresceína, Ácido benzenosselenínico, Química verde.

Introdução

A fluorescência é um fenômeno que pode ser encontrada em várias moléculas orgânicas, como exemplo a rodamina B, bodipy e fluoresceína (Figura 1).



Na literatura encontra-se diversas aplicações da fluoresceína,¹ o que torna a molécula promissora para possíveis modificações na síntese orgânica. Por outro lado, os organocalcogênicos estão se tornando ótimas ferramentas como ligantes seletivos para diferentes analitos, principalmente para oxidantes e íons metálicos.² A funcionalização de moléculas fluorescentes é uma alternativa promissora para aumentar a sensibilidade ou mesmo alterar o comportamento fluorescente da molécula precursora.² Apresentamos aqui os resultados parciais na síntese ambientalmente amigável de fenilselânio-fluoresceína (**3**) e bis-fenilselânio-fluoresceína (**4**) através da reação entre fluoresceína (**1**) e ácido benzenosselenínico (BSA, **2**) utilizando etanol como solvente.



Resultados e discussão

Para determinar a melhor condição reacional, realizou-se um estudo da otimização das condições reacionais, variando o solvente, a temperatura, estequiometria e tempo reacional (Tabela 1). Entre as diferentes condições testadas, observou-se que ao aquecermos uma solução etanólica de fluoresceína com BSA (2 equiv) a 70 °C durante 16 h, obteve-se uma mistura

entre os produtos mono- e disselenilado em um rendimento total de 74%.

Tabela 1. Otimização das condições reacionais.^a

#	Solvente	Temp (°C)	Tempo (h)	3 (%)	4 (%)	Rend. (%)
1	EtOH	70	16	53	21	74
2	[BMIM-BF ₄]	70	16	35	11	46
3	Xileno	70	16	30	25	55
4	^t BuOH	70	16	47	19	66
5	Glicerol	70	16	32	31	63
6 ^b	^t BuOH	82	16	46	31	77
7	EtOH	100	16	49	26	75
8 ^c	EtOH	100	16	26	19	44
9 ^d	EtOH	100	16	31	8	39
10	EtOH	100	24	38	27	65
11	EtOH	100	8	35	-	35
12	EtOH	100	4	30	-	30

^a Uma mistura de Fluoresceína **1** (0,25 mmol) e BSA **2** (0,5 mmol) em etanol (3 mL) como solvente, a 70 °C durante 16 horas foi agitada. Os produtos **3** e **4** foram isolados em placa preparativa. ^b A reação foi realizada com 0,75 mmol de BSA **2**. ^c Reação realizada com 0,25 mmol de BSA **2**. ^d Reação realizada com 0,5 mmol de fluoresceína **1**.

Tentativas de sintetizar seletivamente o derivado monosselenilado **3** e disselenilado **4** alterando a estequiometria da reação não foram bem-sucedidas (entradas 6, 8 e 9). Diferentes solventes foram empregados e, apesar de butanol ter se mostrado tão eficiente como etanol, decidiu-se pelo segundo, já que ele é barato e obtido de biomassa no Brasil.

Conclusões

Foi desenvolvido um método alternativo para funcionalizar a fluoresceína, utilizando BSA e EtOH como solvente. Os únicos subprodutos da reação são água e disselenetos de difenila, que pode ser reutilizado para preparar mais BSA.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq, FAPERGS, CAPES e FINEP.

Referências e notas

- (1) (a) S, K.; Sam, B.; George, L.; N, S. Y.; Varghese, A. J. *Fluoresc.* **2021**, *31* (5), 1251–1276. (b) Le Guern, F.; Mussard, V.; Gaucher, A.; Rottman, M.; Prim, D. *Int. J. Mol. Sci.* **2020**, *21* (23), 9217.
(2) (a) Choi, M. G.; Ryu, H.; Cho, M. J.; Lee, S. K.; Chang, S.-K. *Sens. Actuators B* **2017**, *244*, 307. (b) Soares-Paulino, A. A.; Giroldo, L.; Pradie, N. A.; Reis, J. S.; Back, D. F.; Braga, A. A. C.; Stefani, H. A.; Lodeiro, C.; Dos Santos, A. A. **2020**, *179*, 108355.

Controle da Hidratação de UHPC Por Ressonância Magnética Nuclear

Laura Santos¹ (IC)*, Bruni Salete Maboni¹ (IC), Rosangel Rojas² (PQ), José Rafael Yopez² (PQ), Rosilene Clementin¹ (PQ), Diego Cabrera¹ (PQ), Vania Rodrigues de Lima¹ (PQ). llaurasantos.furg@gmail.com

¹Escola de Química e Alimentos, Programa de Pós-Graduação em Química Tecnológica e Ambiental, ²Escola de Engenharia, Núcleo de Estruturas, Universidade Federal do Rio Grande - Av Itália km 8 sn Carreiros, Rio Grande - 96203 900

Palavras Chave: UHPC, óleo de tungue, RMN de ¹H, corrosão, hidratação.

Introdução

É importante pesquisar ferramentas que minimizem a corrosão de materiais como o Concreto de Ultra Alto Desempenho (UHPC). Neste contexto, o uso de materiais “auto-cicatrizantes” tem proporcionado concretos com mecanismos de auto-cicatrização (SEIFAN et al., 2018). O óleo da semente de tungue (*Vernicia fordii*, OT) tem baixo custo (BANASZKIEWICZ, CZECHOWSKI, 2020), e pode prover a capacidade de auto-regeneração do concreto, retardando seu processo de corrosão (SAMADZADEH et al., 2011). Estudar a hidratação, o processo de endurecimento e aumento da resistência da pasta de UHPC e componentes é necessário para compreender o desempenho dos materiais. Este trabalho avaliou a cinética de hidratação de um UHPC na presença de OT por Ressonância Magnética Nuclear de Hidrogênio (RMN de ¹H).

Resultados e discussão

Foram testadas duas concentrações diferentes de UHPC fraturado e moído. Nestas concentrações, também foram comparadas amostras na ausência e na presença de 1g e 2 g de OT. Dados de tempo de relaxação longitudinal (T₁) mostraram que o UHPC na concentração de 15 µg/mL teve redução dos valores de T₁ proporcional ao aumento da razão gel (concreto)/espaço (poros), referente ao preenchimento de poros com a água ao longo do tempo (Jin et al., 2019). Este comportamento não foi observado para o UHPC na concentração de 7 µg/mL. Os dados de T₁ de ¹H de UHPC a 15 µg/mL contendo 1 g e 2 g de OT indicaram que, mesmo que o tempo de hidratação pareça ter importante influência nas propriedades do UHPC, outros efeitos característicos do OT e aquém do preenchimento dos poros do UHPC por água podem ser determinantes para as mesmas. É possível que ocorra um efeito plastificante devido à polimerização do glicerídeo de ácido alfa-eleosteárico, seu componente principal (YONGSHANG et al., 2009). Entretanto, mais estudos espectroscópicos são necessários para confirmar esta hipótese.

Conclusões

Os resultados obtidos permitiram correlacionar a eficiência de novos UHPC na presença de OT no que tange às suas propriedades e a associação com a cinética de hidratação, a partir de estudos de interações intermoleculares, contribuindo para o planejamento e geração de materiais competitivos de alta durabilidade e qualidade, de baixo custo de manutenção.

Agradecimentos

CNPq/FAPERGS/CAPES.

Referencias e notas

1. Seifan M, Sarmah AK, Ebrahimezhad A, Ghasemi Y, Samani AK, Berenjian A. Bio-reinforced self-healing concrete using magnetic iron oxide nanoparticles. *Appl Microbiol Biotechnol*, 2018.
2. Banaszkiwicz K, Czechowski F. Tung oil as an effective modifier for sulfur polymer cement and its performance in galvanic waste encapsulation. *Heliyon*, 2020.
3. Samadzadeh M, Hatami Boura S, Peikari M, Ashrafi A, Kasirha M. Tung oil: An autonomous repairing agent for self-healing epoxy coatings, *Progress in Organic Coatings*, 2010.
4. Jin D, Lang Z, Yao W. Analysis of Early Performance of Cement Paste by Low Field NMR. *Applied Sciences*, 2019, 896.
5. Yongshang Lu, Richard C. Larock. Novel Polymeric Materials from Vegetable Oils and Vinyl Monomers: Preparation, Properties, and Applications. *ChemSusChem* 2009, 2, 136 – 147. .

PROCESSO HIDROTÉRMICO DE OBTENÇÃO DE AÇÚCARES FERMENTESCÍVEIS A PARTIR DA PALHA DE ARROZ VISANDO A PRODUÇÃO DE BIOETANOL

Daniel da Rosa Couto (IC)*¹, Estêvan Casarin Pereira (IC)¹, Pâmela Moura Costa (IC)¹, Claudio Rafael Kuhn (PQ)¹, Ricardo Peraça Toralles (PQ)¹.

*danielcouto.pl210@academico.ifsul.edu.br

¹Laboratório de Bioquímica Aplicada, Departamento Engenharia Química, IFSUL, Campus Pelotas, Pelotas - RS.
 Palavras Chave: Casca de arroz, Celulose, Hidrólise, Tipo de catalisador, Rendimento, CCD.

Introdução

A produção agrícola de arroz (*Oryza sativa*) gera quantidades significativas de resíduos na forma de casca e palha, principalmente. Cada quilograma de grão colhido é acompanhado pela produção de 1 a 1,5 kg de resíduo¹. Tanto a casca como a palha são matérias primas ricas em substratos lignocelulósicos que tem potencial de ser hidrolisados para obtenção de açúcares fermentescíveis visando a produção de bioetanol. Resumidamente, a produção de bioetanol apresenta as seguintes etapas: pré-tratamento, hidrólise da celulose e fermentação². Aqui, vamos focar no pré-tratamento hidrotérmico da casca de arroz que diminui a rigidez à parede celular e facilitando a hidrólise enzimática posterior. Assim, o objetivo foi estudar o processo hidrotérmico usando como catalisadores H₂SO₄ e NaOH, ambos 1%.

Resultados e discussão

O tratamento hidrotérmico foi conduzido em uma autoclave a 165°C por 30 minutos. As quantidades carregadas foram 520 mL de água, contendo cada um dos 3 tratamentos, 37g de casca de arroz moída. Após o pré-tratamento, a amostra ácida foi neutralizada e determinou-se a concentração de açúcares redutores (AR) usando uma curva padrão de glicose-DNS a 490 nm proposto por Toralles et al. (2014). A Tabela 1 expressa os resultados referentes aos tratamentos aplicados, sendo o tratamento 3 (H₂SO₄ 1%) significativamente superior aos demais usando Tukey (p=0,05).

Tratamento	AR (g L ⁻¹)
1 – Sem Catalisador	0,028 (b)
2 – NaOH a 1%	0,122 (b)
3 – H ₂ SO ₄ a 1%	10,67 (a)

Tabela 1. Estudo do efeito do tipo de catalisador. Todos tratamentos realizados em triplicata.

O tratamento 3 resultou em um rendimento de cerca de 49 % usando a equação proposta na referência². A análise por cromatografia em camada delgada (CCD) do melhor tratamento (H₂SO₄ a 1%) e padrões encontram-se na Figura 1. Os padrões de celulose, celobiose e glicose apresentaram deslocamentos em termos de índices de retenção (IR) de 0 - 0,705 - 0,753, respectivamente. O IR da amostra do pré-tratado revelou a presença tanto de glicose como celobiose, corroborando que houve hidrólise parcial da casca de arroz.

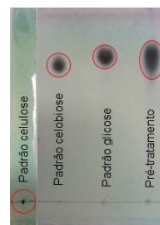


Figura 1. Cromatografia em camada delgada.

Conclusões

O melhor resultado alcançado para a obtenção de açúcares fermentescíveis foi para o tratamento 3 (H₂SO₄ 1%). Tanto os resultados obtidos através dos açúcares redutores como análise cromatográfica corroboram que houve uma hidrólise parcial com rendimento de 49%.

Agradecimentos

FAPERGS e IFSUL.

Referencias e notas

- (1) Binod, P.; Sindhu, R.; Singhanian, R. R.; Vikram, S.; Devi L.; Nagalakshmi, S.; Kurien, N.; Sukumaran, R. K.; Pandey, A. Bioethanol production from rice straw: an overview. *Bioresource technology*, 101(13), 4767-4774, 2010.
- (2) Khodaverdi, M.; Jeyhanipour, A.; Karimi, K.; Taherzadeh, M. J. Kinetic modeling of rapid enzymatic hydrolysis of crystalline cellulose after pretreatment by NMMO. *J. Ind. Microbiol. Biotechnol.*, v. 39, p. 429-438, 2011.
- (3) Toralles, R.; Kuhn, C.; Sá, P.; Ruiz, W. Extração e caracterização parcial de invertase de levedura de purê e resíduo de pêssego. *Rev. Bras. Tecnol. Agroind.*, 8 (2), 1399-1415, 2014.

Cicloadição de Arilazidas com α -2-Piridinil-acetofenonas Catalisada por DBU

Lívia Drawanz Jeske* (IC), Allya Larroza (PG), Diego Alves (PQ)

E-mail correspondente: liviadjeske@gmail.com

Laboratório de Síntese Orgânica Limpa- LASOL, Universidade Federal de Pelotas-UFPel, Pelotas, RS, Brasil

Palavras Chave: cicloadição, síntese de 1,2,3-triazóis, organocatálise

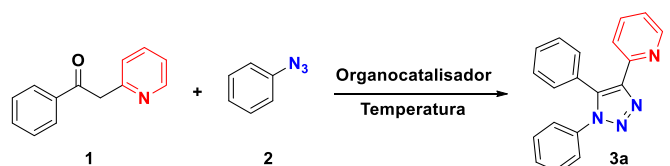
Introdução

A síntese de 1,2,3-triazóis representa um campo de considerável interesse, uma vez que esses compostos funcionalizados desempenham um papel fundamental em diversas áreas.¹ Diversas abordagens para a obtenção dessas estruturas estão documentadas na literatura, incluindo reações de cicloadição 1,3-dipolar envolvendo azidas e alcinos. No entanto, esses métodos tradicionais frequentemente envolvem altas temperaturas e requerem o uso de catalisadores metálicos à base de cobre ou rutênio, o que pode apresentar desafios significativos.¹ Como resposta a essas limitações, a organocatálise emergiu como uma alternativa mais sustentável e eficaz para a síntese de compostos 1,2,3-triazólicos, utilizando bases orgânicas como catalisadores.¹ Com o crescente interesse em métodos de síntese mais eficientes e ecologicamente conscientes para a obtenção de moléculas contendo a unidade triazólica, este estudo tem como objetivo pioneiro a síntese de 1,2,3-triazóis até então não descritos na literatura, empregando a abordagem da organocatálise.

Resultados e discussão

Para alcançar o nosso objetivo definido, procedemos inicialmente com a reação entre a 1-fenil-2-(piridin-2-il)etan-1-ona **1** e a fenilazida **2**, baseando-nos em estudos previamente documentados na literatura.² Nesse processo, empregamos pirrolidina como organocatalisador, na quantidade de 10 mol%, e utilizamos DMSO como solvente, mantendo a temperatura a 70 °C. Após 24 horas de reação, obtivemos o produto desejado **3** com um rendimento de 30%. A fim de otimizar a eficiência na obtenção do produto desejado, conduzimos uma série de experimentos variando as condições de reação. Foram testados diferentes organocatalisadores e temperaturas para identificar as condições ideais (Tabela 1, Linhas 1-7). Após estabelecer o DBU como o melhor catalisador, realizamos estudos para avaliar a relação entre a quantidade de organocatalisador e a temperatura (Tabela 1, Linhas 8-11). Como resultado desses

experimentos, observamos que a condição de reação mais eficiente para os substratos em questão envolve o uso de 5 mol% de DBU como organocatalisador, empregando DMSO como solvente a 50 °C, o que resultou na obtenção do produto **3** com um rendimento de 93% (Tabela 1, Linha 11).

Tabela 1. Otimização das condições de reação.^a


Linha	Catalisador (mol%)	T (°C)	Rendimento 3a (%) ^b
1	Pirrolidina (10)	70	30
2	Prolina (10)	70	18
3	Et ₂ NH (10)	70	21
4	DABCO (10)	70	36
5	Et ₃ N (10)	70	17
6	DBU (10)	70	97
7	-	70	11
8	DBU (10)	30	79
9	DBU (2)	30	36
10	DBU (2)	70	50
11	DBU (5)	50	93

^a Reações realizadas utilizando-se 0,25 mmol da 1-fenil-2-(piridin-2-il)etan-1-ona **1**, 0,375 mmol da fenilazida **2** e 0,5 mL de DMSO como solvente. ^b Rendimento do produto isolado.

Conclusões

Com base no objetivo estabelecido, conseguimos sintetizar com sucesso o triazol **3** empregando um método altamente eficaz. Além disso, planejamos conduzir testes com diferentes α -2-piridinil-acetofenonas e azidas orgânicas distintas, visando avaliar a versatilidade desse método.

Agradecimentos

LaSOL, CNPq, CAPES, FAPERS e a UFPel.

Referências e notas

(1) Alves, D.; Goldani, B.; Lenardão, E. J.; Perin, G.; Schumacher, R. F.; Paixão, M. W. *Chem. Rec.* **2018**, *18*, 527. (2) Shashank, A. B.; Karthik, S.; Madhavachary, R.; Ramachary, D. B. *Chem. Eur. J.* **2014**, *20*, 16877.

Análise da composição química da biomassa larval de mosca doméstica (*Musca domestica*)

Tamara Mendes Leite Silva Trindade^{1*} (PG), Carem Perleberg¹ (IC), Carina Machado Lima¹ (IC), Gabrielly Quartieri Sejanos¹ (IC), Juliana Porciuncula da Silva¹ (IC), Cristina Jansen Alves² (PQ), Claudio Martin Pereira de Pereira¹ (PQ)

Email: tamaramlstrindade2611@gmail.com*

¹Centro de Ciências Químicas Farmacêuticas e de Alimentos CCQFA – Laboratório de Lipidômica e Bioorgânica - UFPel

²Departamento de Ciência e Tecnologia Agroindustrial - UFPel

Palavras Chave: Inseto, Lipídeo, Proteína, Composição Química.

Introdução

Os insetos são fontes de proteínas, ácidos graxos insaturados e minerais e podem ser utilizados na alimentação animal¹. A mosca doméstica (*Musca domestica*) é um inseto com alto teor de proteínas e lipídios². A produção da sua biomassa é um processo ecológico porque não há desperdício, e é de baixo custo. Em comparação com outras espécies, esta espécie de inseto tem um tempo de criação curto, adaptação a temperaturas elevadas³. Desta forma, este trabalho teve como objetivo analisar a composição química da biomassa larval de mosca doméstica.

Resultados e discussão

As porcentagens de proteína, lipídeos, açúcares, umidade e cinzas estão apresentadas na Tabela 1. Foi observada uma alta concentração de proteínas (53,2%), e de lipídeos (28,6%) na biomassa larval. O teor de cinzas obtido foi de $6,8 \pm 0,03\%$, enquanto o teor de açúcar foi $0,4 \pm 0,1\%$.

O conteúdo lipídico da biomassa larval relatado na literatura foi de 13,2%, valor inferior ao encontrado neste trabalho. Segundo Liu et al. (2017)⁴, na fase larval, as moscas acumulam proteínas e lipídios, como fonte de reserva energética necessária na fase pupal para o seu desenvolvimento até a fase adulta.

Quanto ao teor de cinzas, valores semelhantes foram observados por Liu et. al (2017)⁴ para a biomassa da mosca Soldado Negro, variando de 7,8% a 10,3% na fase larval. O teor de cinzas é um parâmetro importante a ser analisado por estar relacionado à quantidade de minerais presentes. A quantidade de carboidratos presentes nesta biomassa foi baixa e é bastante variável entre as espécies de insetos⁵.

Teores de umidade elevados facilitam a proliferação por bactérias e fungos, diminuindo a vida útil da biomassa. A biomassa larval apresentou um teor de

umidade baixo, dentro da faixa ideal para farinha destinada a alimentação animal⁶.

Tabela 1 Porcentagem de proteínas, lipídeos, açúcares umidade e cinzas da biomassa larval da mosca doméstica.

Composição	Biomassa larval (%)*
Proteínas	53,2 ± 0,73
Lipídeos	28,6 ± 1,25
Açúcares	0,4 ± 0,09
Umidade	4,92 ± 0,06
Cinzas	6,8 ± 0,03

* = massa seca

Conclusões

As porcentagens obtidas de proteínas e de lipídeos se apresentaram maiores que as relatadas na literatura, reforçando o valor nutricional da biomassa larval de mosca doméstica.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio da CAPES, do CNPq, da FAPERGS (22/2551-0000840-2) e da UFPel.

Referencias e notas

- (1) Bene H. M.; Gasco L.; Piccolo G.; Fountoulaki E. *Anim. Feed Sci. Technol.* **2015**, 203, 1.
- (2) Kierończyk B. et. al. *Annals of Animal Science.* **2020**.
- (3) Eggink K. M. et. al. *PLoS One.* **2022**, 17, 9.
- (4) Liu X. et. al. *PLoS One.* **2017**, 12, 8.
- (5) Sánchez M. et. al. *LWT*, **2022**, 163.
- (6) Awoniyi, T. A. M.; Adetuyi, F. C.; Akinyosoye, F. A. *J. Food. Agric. Environ.* **2004**, 2, 3-4

Síntese em larga escala de curcumina via ultrassom

Samuel Alves Pereira¹ (IC)*, Carina Machado Lima¹ (IC), Victoria Borges Vaz de Leon¹ (IC), Caroline Ieque Silveira¹ (IC), Taís Poletti¹ (PG), Claudio Martin Pereira de Pereira¹ (PQ), Bruno Nunes da Rosa¹ (PQ).

¹Universidade Federal de Pelotas (UFPel), Pelotas-RS; *samuel_alvespereira@hotmail.com

Palavras Chave: Irradiação Ultrassônica, Curcumina, Otimização, Larga Escala.

Introdução

A curcumina, substância majoritária presente na cúrcuma (*Cúrcuma Longa Linn*), possui diversas aplicações, sendo elas farmacológica, antitumoral, papiloscópica e outras. Contudo, os produtos naturais apresentam alguns obstáculos na sua utilização, tendo que utilizar técnicas para sua purificação e separação, as quais resultam em alto custo e impacto ecológico. Porém, na atualidade alguns autores relatam a síntese de análogos de curcumina em apenas duas etapas através da reação de condensação aldólica¹. Da mesma forma, observou-se na literatura que a irradiação ultrassônica pode otimizar e acelerar uma síntese devido o processo de cavitação². Assim, a utilização do ultrassom na produção de análogos de curcumina em larga escala pode ser promissor considerando o rendimento, tempo e o custo da reação. Nesse sentido, o objetivo deste trabalho é realizar a síntese em larga escala da curcumina 2,6-Dibenzilidenociclohexanona utilizando a irradiação ultrassônica, além de realizar uma comparação com síntese de modo convencional.

Resultados e discussão

A síntese de 1 mol de curcumina derivada do benzaldeído e da ciclohexanona foi realizada no modo convencional e no método de irradiação ultrassônica conforme **Figura 1**. Ambas as moléculas foram caracterizadas por Cromatografia Gasosa acoplada a Espectrometria de Massas (CG-EM) apresentando o íon molecular de 274 m/z, o que foi condizente com a massa molecular exata da curcumina em questão. Além disso, foi observado apenas um único pico em seu cromatograma, o que demonstrou a pureza da molécula. A síntese em modo convencional ocorreu em um tempo reacional de 4h, com um rendimento de 86%. Enquanto que, a síntese via ultrassom decorreu em um tempo reacional de 15 min com um rendimento de 92,3%. Comparando os métodos, notou-se que a utilização da irradiação ultrassônica foi mais eficaz devido a diferença do tempo reacional e do melhor rendimento da molécula no mesmo custo de reagentes de partida. Desta forma, os análogos de curcumina podem ser produzidos em largas escalas e aplicados em diversas áreas que necessitem de uma reprodutibilidade maior, por

exemplo, na área das Ciências Forense como reveladores de impressões digitais.



Figura 1. Síntese da curcumina no modo convencional (A1) e no método de irradiação ultrassônica (A2).

Conclusões

Em suma, o ultrassom para a síntese em larga escala é uma alternativa viável e eficaz. O método propiciou uma excelente eficiência produtiva de forma reprodutível e com menor tempo reacional.

Agradecimentos

À UFPel, à organização da SBQSul 2023 e aos órgãos de fomento CAPES, CNPq, FAPERGS e INCT.

Referencias e notas

- (1) PACHECO, B. S.; SILVA, C. C.; ROSA, B. N.; MARIOTTI, K. C.; NICOLODI, C.; POLETTI, T.; SEGATTO, N. V.; COLLARES, T.; SEIXAS, F. K.; PANIZ, O.; CARREÑO, N. L. V.; PEREIRA, C. M. P. *Chemical Papers*, **2021**, v.75, p.3119-3129.
- (2) YINGJIE, L.; YE, B.; JIE, O. **2011**. *Advanced Materials Research*, v 332-334, 1623-1626.

Composição de Ácidos Graxos do óleo de mosca doméstica (*Musca Domestica*) determinado por CG-MS

Gabrielly Quartieri Sejanés^{1*} (IC), Juliana Porciuncula da Silva¹ (IC), Tamara Mendes Leite Silva Trindade¹ (PG), Rayane Braga Martins¹ (IC), Carem Perleberg¹ (IC), Cristina Jansen Alves¹ (PQ), Claudio Martin Pereira de Pereira¹ (PQ). Email: gabrielly.q.sejanés@gmail.com

¹Centro de Ciências Químicas Farmacêuticas e de Alimentos CCQFA – Laboratório de Lipidômica e Bioorgânica – UFPel – Pelotas, Campus Universitário, s/n, 96010-900, Pelotas, RS, Brasil
 Palavras Chave: Cromatografia, Insetos, Oleico, Linoleico, Ômega, Alimentação.

Introdução

O mercado de nutrição animal cresce devido à demanda por rações avícolas e alimentos funcionais para o gado, impulsionada pelo aumento populacional previsto para 9 bilhões até 2050¹.

A partir disso, fontes alternativas de biomassa como, os insetos, se tornam alternativas sustentáveis, para o desenvolvimento de suplementos e bioprodutos.

Este trabalho tem como objetivo realizar a composição de ácidos graxos do óleo obtido a partir da biomassa de mosca doméstica utilizando CG-MS.

Resultados e discussão

A extração do óleo da biomassa da mosca doméstica resultou em um rendimento de 26,27% ± 1,54.

Tabela 1. Composição Relativa (%) de ácidos Graxos no óleo de Mosca Doméstica

Ácidos Graxos	Nomenclatura Usual	Concentração (%)
C14:00	Éster Metílico do Ácido mirístico	2.31
C16:00	Éster Metílico do Ácido palmítico	30.61
C16:1	Éster Metílico do Ácido palmitoleico	4.20
C18:2	Éster Metílico do Ácido Linoleico	32.10
C18:1	Éster Metílico do Ácido Oleico	24.11
C18:0	Éster metílico do Ácido Esteárico	4.74
Outros		1.92
Σ SFA		37.66
Σ MFA		28.31
Σ PUFA		32.10

Σ soma dos SFA: Ácidos Graxos Saturados; MFA: Ácidos Graxos Monoinsaturados; PUFA: Ácidos Graxos Poli-insaturados.

A análise por Cromatografia Gasosa acoplada a Espectrometria de Massas (CG-MS) identificou seis compostos, dentre eles o ácido linoleico (32,10%), ácido palmítico (30,61%) e ácido oleico (24,11%), sendo os principais. É importante destacar que a soma dos ácidos graxos monoinsaturados e poli-insaturados (60,41%), superou os ácidos graxos saturados (37,66%). Esse fator pode ser considerado importante, devido ao benefício que ocasiona aos animais no combate à inflamação e ao estresse oxidativo, além de interferir positivamente no metabolismo lipídico e ganho de peso dos mesmos².

Conclusões

A extração do óleo de mosca doméstica com um rendimento significativo e, com um alto teor de ácidos graxos insaturados, como Ômega 3 e 6, é considerada com grande potencial para utilização na alimentação animal.

Agradecimentos

UFPel, CAPES, FAPERGS 22/551-0000840-2 e CNPq.

Referencias e notas

- (1) Ahmed, N., Turchini, G.M. *Sustain Sci.* **2021**, v. 16, p. 1375–1390. <https://doi.org/10.1007/s11625-021-00924-z>.
- (2) Bezerra, B. M. O., Parente, R. A., Andrade, T. S., Watanabe, P. H., Evangelista, J. N. B., Nunes-Pinheiro, D. C. S. *Arq. Bras. Med. Vet. Zootec.* **2020**, v. 27, n. 3, p. 1009 – 1016.

Óleo de arroz como atrativo no manejo de insetos-praga de armazenamento

Andrey Martinez Rebelo^{1*}; Marcelo Mendes Haro²; Lizandra Maria Zimmermann³

1- Epagri, Rodovia Antônio Heil, 6800, Itaipava - Itajaí (SC) - (Pesquisador (PQ)) - andrey@epagri.sc.gov.br*.

2- Epagri, Rodovia Antônio Heil, 6800, Itaipava - Itajaí (SC) - (Pesquisador (PQ)).

3- FURB, Rua Antônio da Veiga, 140, Itoupava Seca - Blumenau (SC) - (Pesquisadora (PQ)).

Palavras Chave: *Sitophilus zeamais*, Insetos de armazenamento, Atratividade.

Introdução

Existe a necessidade de evitar perdas durante o armazenamento. *Sitophilus zeamais* (Sz), podem ser responsáveis por perdas de até 10% dos grãos armazenados. O controle destes tem sido realizado, com produtos sintéticos cujo desenvolvimento não previu o uso contínuo/irracional que pode eliminar inimigos naturais, intoxicar trabalhadores, contaminar fontes hídricas e os alimentos, além de favorecer a seleção de insetos resistentes¹. Os produtos de origem vegetal podem ser uma opção sustentável, acessível aos agricultores². Os fitoquímicos são os principais componentes responsáveis pelas interações inseto-planta³. Muitas destas substâncias possuem efeito inseticida, repelente, estimulante, fago-inibidora e atrativas⁴. O óleo de arroz é extraído do farelo de arroz e é rico de inúmeras substâncias como: vitamina E; γ -orizanol; ácidos graxos; tocoferol e β -caroteno⁵. Nesta fração apolar do arroz, alguns destes compostos podem ser responsáveis por atrair o Sz, que busca no arroz fonte de alimento. Baseado nesta possibilidade avaliou-se o efeito atrativo do óleo de arroz, como possibilidade deste poder ser empregado em armadilhas.

Resultados e discussão

O óleo de arroz atraiu significativamente o *S. zeamais* nos bioensaios em arena X, compostas por câmara central ligada a 4 laterais. A frequência de insetos nas câmaras contendo o óleo foi de 63,59(\pm 3,31)%. Por outro lado, 35,56(\pm 2,46)% apresentaram preferência pelo tratamento contendo o controle e 0,57(\pm 0,16)% não apresentaram escolha após 48 h. A repelência foi analisada pelo teste de frequência Qui-Quadrado (X^2) ao nível de 5% de probabilidade (Figura 1). Possivelmente, o efeito atrativo está ligado à presença de metabólitos presentes no óleo, pois este óleo é rico em inúmeros compostos que podem ser rica fonte de energia e compostos essenciais à dieta deste inseto.

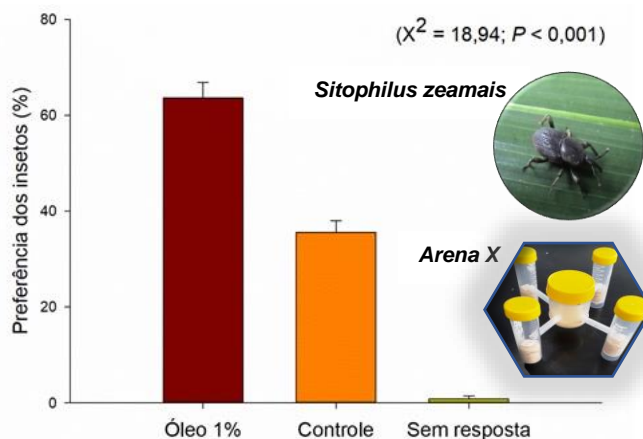


Figura 1. Resultados dos testes, com *Sitophilus zeamais*, de atratividade em arena X, do óleo de arroz a 1% em tween 80 a 1%, empregando como estímulo alimentar o arroz.

Conclusões

O uso do óleo de arroz tem potencial como atrativo aos insetos testados. Com este potencial atrativo, a estratégia pode ser empregada em armadilhas que atrairiam os insetos, evitando o ataque aos grãos armazenados. A explicação para o efeito atrativo deve ser mais bem compreendida, à luz da constituição química do óleo, ou pela ação sinérgica dos ativos, fazendo com que os insetos desviem de seu alvo, o grão armazenado, reduzindo o prejuízo na produção.

Agradecimentos

À Fapesc pelo suporte financeiro.

Referências e notas

- (1) Nayak, M.K.; Collins, P.J. *Pest Manag Sci*, **2008**, 64, 9, 971.
- (2) Rajendran, S.; Sriranjini, V. *Prod Research*, **2008**, 44, 2, 126.
- (3) Kaplan, I. *Biological Control*, **2012**, 60, 2, 77.
- (4) Regnault-Roger, C.; Vincent, C.; Arnason, J.T. *Annual Rev Ent*, **2012**, 57, 1, 405.
- (5) Santestevan, V.A. Desenvolvimento de metodologia para análise de óleo de arroz. [mestrado]. UFRGS, Porto Alegre, **2011**. 84p.

Atividade Antioxidante *in vitro* do Óleo Essencial das Folhas da *Tagetes Minuta* LinnLivia C. L. Valente(IC)^{1*}, Raquel G. Jacob(PQ)¹, Jenifer Fetter(PG)², Lucielli Savegnago(PQ)² e Daniela Hartwig(PQ)¹¹Laboratório de Síntese Orgânica Limpa – LASOL, Centro de Ciências Químicas Farmacêuticas e de Alimentos – CCQFA, Universidade Federal de Pelotas – RS, Brasil. (*livia.valente32@gmail.com) ²Grupo de Pesquisa em Neurobiotecnologia – GPN – Centro de Desenvolvimento Tecnológico – CDTec, Universidade Federal de Pelotas – RS, Brasil.Palavras Chave: Química Orgânica, Óleo Essencial, Atividade Antioxidante, *Tagetes Minuta*.

Introdução

O estudo das potencialidades biológicas de óleos essenciais (OE) extraídos de plantas medicinais e aromáticas tem se tornado uma fonte crescente de pesquisa, principalmente quando avaliada a sua aplicação terapêutica.¹ A *Tagetes Minuta* Linn é uma planta aromática que se destaca por sua composição química e por suas diversas propriedades bioativas e terapêuticas.² Os constituintes químicos presentes em alguns OE apresentam propriedades antioxidantes.¹ Esses compostos com ação antioxidante possuem a capacidade de neutralizar espécies reativas de oxigênio e nitrogênio, as quais estão presentes ou são produzidas em desequilíbrio nos diferentes organismos. O desequilíbrio resulta em estresse oxidativo, o qual está relacionado ao desenvolvimento de patologias.³ Nesse contexto, considerando as propriedades biológicas da planta e o interesse em novos compostos antioxidantes, este estudo objetiva avaliar a capacidade antioxidante do OE das folhas de *Tagetes minuta* por meio de técnicas *in vitro*.

Resultados e discussão

O OE das folhas de *Tagetes minuta* foi extraído por destilação por arraste a vapor de plantas cultivadas em Pelotas-RS. Com relação a composição química, seus constituintes majoritários são a dihidrotagetona (57%) e a (Z)-tagetona (22%). Os resultados obtidos a partir dos ensaios antioxidantes *in vitro* revelaram que o OE das folhas demonstrou efeito antioxidante. Constatou-se que o OE teve capacidade de neutralizar tanto as espécies radicalares sintéticas de ABTS quanto de DPPH, as quais atuam por diferentes mecanismos de neutralização. A capacidade antioxidante do OE também pode ser estudada a partir do experimento que avalia o potencial redutor do íon férrico (Fe³⁺) (FRAP) a íon ferroso (Fe²⁺), onde observou-se resultados promissores. A partir desses três experimentos, podemos evidenciar que os mecanismos de ação antioxidante dos compostos presentes no OE, envolvem tanto sua capacidade em compartilhar prótons (DPPH) quanto o compartilhamento de elétrons (ABTS e FRAP).

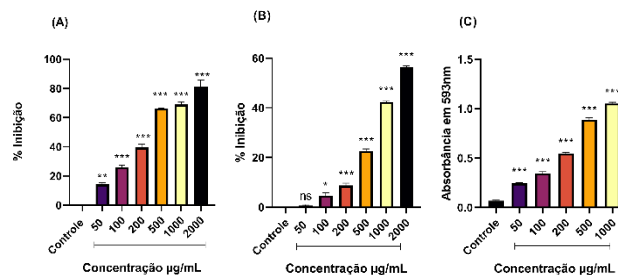


Figura 1. Atividade antioxidante frente a captura dos radicais sintéticos (A) 2,2'-azinobis (3-etilbenzotiazolina-6-ácido sulfônico) e (B) 2,2-difenil-1-picril-hidrazila apresentada pelo OE de *Tagetes Minuta*. (C) Avaliação do potencial redutor do íon férrico (FRAP) apresentado pelo OE de *Tagetes Minuta*. Os dados são apresentados como a média ± desvio padrão da média dos valores de absorvância a (A) 517 nm, (B) 734nm e (C) 593 nm (n = 3). (* p < 0,05 e (***) p < 0,001 expressa níveis de significância quando comparado ao grupo controle.

Conclusões

Com base nos resultados apresentados, pode-se concluir que o OE das folhas de *Tagetes Minuta* apresenta resultados promissores quanto a sua capacidade antioxidante. Entretanto, estudos complementares ainda precisam ser desenvolvidos para compreender melhor o seu mecanismo de ação.

Agradecimentos

Os autores agradecem as agências de fomento CAPES, CNPQ e FAPERGS.

Referências e notas

- (1) Bakkali, F., Averbeck, S., Averbeck, D., Idaomar, M. *Food Chem. Toxicol.* **2008**, 46, 446-475.
- (2) Walia, S., Mukhia, S., Bhatt, V., Kumar, R. *Ind. Crops Prod.* **2020**, 150, 112449.
- (3) Cavalcante, K., Calegari, G., Orsato, A., Perez, C. *Rev. Virtual Quim.* **2022**, 15, 248-261.

SÍNTESE DE CURCUMINAS DERIVADAS DE CICLOCETONAS VIA ULTRASSOM

Carina Machado Lima¹(IC)*, Caroline Ieque Silveira²(IC), Rayane Braga Martins²(IC), Samuel Alves Pereira²(IC), Victoria Borges Vaz de Leon² (IC), Bruno Nunes da Rosa²(PQ), Claudio Pereira de Pereira³(PQ).

¹ Universidade Federal de Pelotas (UFPEL), Pelotas-RS; carinamachadolima@hotmail.com

Palavras Chave: Curcumina, Ultrassom, Química Verde, Síntese.

Introdução

A curcumina é um importante composto da cúrcuma de grande interesse devido às suas propriedades físico-químicas e também suas atividades antioxidantes e bioquímicas. Atualmente a síntese de análogos de produtos naturais, têm tido uma elevada importância para desenvolvimento e aplicação de novos análogos, pois fornecem produtos com modelo estrutural semelhante ao produto desejado, mas com diferentes grupos substituintes ligados a anéis aromáticos. Pela necessidade atual de desenvolvimento de sínteses com redução de tempo e maior eficiência, métodos não convencionais como o ultrassom (US), por exemplo, têm tido elevado destaque, devido à promoção de uma química verde pela redução de tempo, minimização de resíduos e economia de energia. Deste modo, o objetivo desse trabalho é realizar a síntese de Curcuminas derivadas de ciclocetonas por irradiação ultrassônica.

Resultados e discussão

As sínteses foram realizadas conforme a **Figura 1**, com 8 mL de etanol, 10 mmol de benzaldeído para 5 mmol de diferentes cetonas cíclicas e 5 mL KOH 20%. Para o método convencional, os compostos **3a-b** e **3c-d** foram deixados sob agitação por 4 e 24h, respectivamente. Enquanto pelo ultrassom a síntese ocorreu em 10 minutos. Após esse período, os compostos foram neutralizados com HCl 10% e posteriormente filtrados e secos a temperatura ambiente.

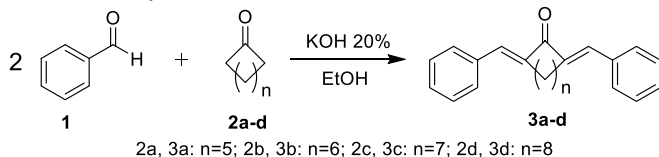
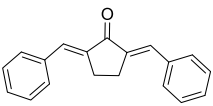
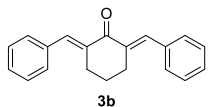
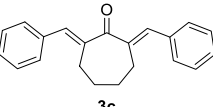
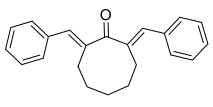


Figura 1. Esquema da reação da Síntese de Curcuminas. As moléculas foram caracterizadas por Cromatografia Gasosa acoplada a Espectrometria de Massas apresentando seus íons moleculares condizentes com a massa exata de cada curcumina em questão. Além disso, foi observado apenas um pico em seus cromatogramas, o que demonstra a pureza de cada molécula. De acordo com **Tabela 1** é possível observar

que a síntese via ultrassom proporcionou bons rendimentos em menores tempos quando comparado com a metodologia convencional.

Tabela 1. Curcuminas sintetizadas

Comp.	PM (g/mol)	Tempo US*/C**	Rendimento (%) US*/C**
 3a	260,4	10 min / 4 h	60% / 46%
 3b	274,4	10 min / 4 h	60% / 47%
 3c	288,4	10 min / 24 h	83% / 76%
 3d	302,4	10 min / 24 h	73% / 82%

*Ultrassom; **Convencional.

Conclusões

Em suma, a síntese das curcuminas foi promissora com a utilização de irradiação ultrassônica. Uma vez que, proporcionou bons rendimentos comparado com a metodologia convencional e em menores tempos de reação. Além disso, os compostos são reprodutíveis e foram obtidos com alto grau de pureza, o que dá uma confiabilidade para posteriores aplicações.

Agradecimentos

À UFPEL, à organização da SBQSul 2023 e os órgãos de fomento CAPES, CNPq, FAPERGS.

Referencias e notas

VENZKE, D. *Ultrason. Sonochem.* 18, 1, p. (370-374), janeiro 2011.

POLETTI, T. *Talanta Open.* 6, Dezembro 2022.

Isomerização de 1,4-Dialquinóis em Meio Básico para a Síntese de Pent-1-en-4-in-3-onas

Carolina A. de Oliveira¹ (IC), Caroline S. Gomes¹ (PG), Gabriele A. Aldrighi² (IC), Estefani C. Pereira² (IC),
Juliano A. Roehrs^{2*} (PQ), e Eder J. Lenardão^{1*} (PQ)

¹Laboratório de Síntese Orgânica Limpa - LASOL, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos (CCQFA), Universidade Federal de Pelotas – UFPel, Pelotas, RS, Brasil

²Instituto Federal de Educação Ciência e Tecnologia Sul-rio-grandense – IFSul, Pelotas, RS, Brasil. *E-mail: julianoroehrs@gmail.com (JAR) e lenardao@ufpel.edu.br (EJL)

Palavras-Chave: 1,4-Penteninonas, Isomerização, 1,4-Dialquinóis

Introdução

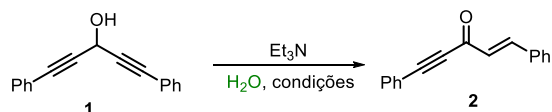
As 1,4-penteninonas conjugadas têm atraído o interesse de pesquisadores por serem consideradas blocos de construção para uma ampla variedade de unidades heterocíclicas, uma vez que as ligações C≡C, C=C e C=O presentes nas 1,4-penteninonas podem ser seletivamente modificadas levando à formação de morfolinás, piridinas, furanos e tiofenos, por exemplo.¹ Para acessar as 1,4-penteninonas, os métodos descritos na literatura utilizam catalisadores de metais de transição, bases fortes, longos tempos de reação, além de envolverem diversas etapas e a formação de subprodutos.² Portanto, é importante desenvolver rotas sintéticas mais limpas e que estejam de acordo com os princípios da química verde.³ Assim, descrevemos aqui os resultados preliminares de uma nova metodologia para a síntese seletiva de 1,4-penteninonas a partir de 1,4-dialquinóis na presença de trietilamina como base e água como solvente.

Resultados e discussão

Inicialmente, realizou-se um estudo de otimização das condições de reação (Tabela 1). A trietilamina foi escolhida como base e a água como solvente na isomerização do 1,4-dialquinol **1**. Ao utilizar trietilamina e água na proporção 1:1 a 100 °C durante 21 h, a 1,4-penteninona **2** foi obtida em 87% de rendimento (linha 1). Reduzindo o tempo de reação para 6 horas, o rendimento aumentou para 97% (linha 2). Na ausência de água, o tempo de reação foi estendido para 22 horas à 80 °C, resultando em um rendimento de 94% (linha 3). Quando a reação foi conduzida à temperatura ambiente, o rendimento diminuiu para 10% (linha 4). Adicionando uma gota do detergente tween 80, o rendimento foi de 96% após 21 h à 80 °C (linha 5). Utilizando um excesso de trietilamina ou água na reação (linha 6 e linha 7), o rendimento permaneceu alto (95 e 97%) com o tempo de reação reduzido para 5 e 6 horas respectivamente. Por fim, fazendo uso de 0,25 mL de trietilamina e 0,25 mL de água na reação, o rendimento foi de 90% (linha 8). Portanto, a melhor condição de reação foi

estabelecida como sendo a da linha 6, onde o produto foi obtido com um rendimento de 95%.

Tabela 1. Otimização das condições de reação.^a



#	Et ₃ N (mL)	H ₂ O (mL)	Temp. (°C)	Tempo (h)	Rend. (%)
1	0,5	0,5	100	21	87
2	0,5	0,5	100	6	97
3	1,0	-	80	22	94
4	1,0	-	25	27	10
5 ^b	0,5	0,5	80	21	96
6	0,25	0,75	100	5	95
7	0,75	0,25	100	6	97
8	0,25	0,25	100	5	90

^a Uma mistura de 1,4-dialquinol **1** (0,25 mmol), trietilamina e água foi agitada sob aquecimento. O produto **2** foi purificado por cromatografia em coluna. ^b Foi adicionado 1 gota de tween 80.

Conclusões

Este estudo resultou no desenvolvimento de uma nova rota para o preparo de 1,4-penteninona a partir da isomerização de 1,4-dialquinol mediada por trietilamina. A reação é conduzida em meio aquoso, com excelente seletividade e rendimento. Como perspectivas futuras, serão realizados estudos de escopo e mecanismo da reação.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq, FAPERGS, CAPES, PROPESP-IFSul e FINEP.

Referências e notas

- (1) (a) Odín, I. S.; Chertov, A. Y.; Grigor'eva, O. B.; Golovanov, A. A. *J. Org. Chem.* **2022**, *87*, 5916. (b) Miki, K.; Uemura, S.; Yokoi, T.; Nishino, F.; Kato, Y.; Ohe, K. *J. Org. Chem.* **2004**, *69*, 1557. (c) Wen, M.; Sun, P.-P.; Luo, X.; Deng, W.-P. *Tetrahedron* **2018**, *74*, 4168.
- (2) (a) Chen, J.; Fana, G.; Liu, Y. *Org. Biomol. Chem.* **2010**, *8*, 4806. (b) Chinta, B. S.; Baire, B. *J. Org. Chem.* **2015**, *80*, 10208. (c) Golovanov, A. A.; Latypova, D. R.; Bekin, V. V.; Pisareva, V. S.; Vologzhanina, A. V.; Dokichev, V. A. *Russ. J. Org. Chem.* **2013**, *49*, 1264.
- (3) Lenardão, E. J.; Freitag, R. A.; Batista, A. C. F.; Dabdoub, M. J.; Silveira, C. C. *Quím. Nova* **2003**, *26*, 123.

Síntese de benzo[*b*]calcogenofenos selenados promovida por ácido tricloroisocianúricoGustavo Bierhals Blödorn (PG)^{1*}, Márcio S. Silva (PQ)¹, Diego Alves (PQ)¹*Email correspondente: gustavoblodorn@hotmail.com¹Laboratório de Síntese Orgânica Limpa (LaSOL), Departamento de Química, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, RS, Brasil
Palavras Chave : Selênio, Ácido Tricloroisocianúrico, Ciclização, Heterociclos.

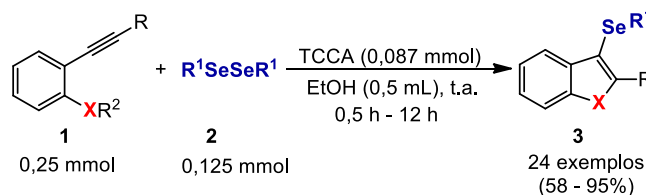
Introdução

Os compostos heterocíclicos, principalmente aqueles que contém átomos de calcogênio, têm atraído grande interesse, majoritariamente, devido à sua versatilidade, pois podem ser aplicados em diferentes áreas, tais como bioquímica,¹ eletroquímica² e ciência dos materiais.³ Entre os compostos heterocíclicos, os benzo[*b*]calcogenofenos demonstram grande importância, podendo ser aplicados em diversas áreas. Exemplos de sua aplicabilidade, é a utilização em dispositivos ópticos como diodos orgânicos emissores de luz (OLEDs),⁴ assim como na preparação de materiais transistores orgânicos de efeito de campo (OFETs).⁵ Desta forma, o objetivo deste trabalho é desenvolver um novo protocolo para a síntese de 3-organosselânio-benzo[*b*]calcogenofenos promovido pelo ácido tricloroisocianúrico (TCCA).

Resultados e discussão

Utilizando 0,25 mmol dos alquinos **1** e 0,125 mmol dos disselenetos de diorganoila **2** com 0,087 mmol de TCCA como agente oxidante à temperatura ambiente, obteve-se 24 exemplos, que foram sintetizados com rendimentos que variaram de 58% a 95% (Esquema 1). Com o método desenvolvido, foi possível obter 4 unidades estruturais heterocíclicas diferentes. Além disso, o método foi eficiente para disselenetos de diorganoila contendo grupos retiradores e doadores de elétrons, assim como, para disselenetos estericamente impedidos e alifáticos.

A reação ocorre através da formação de espécies de selênio eletrofílico *in situ* pela reação do TCCA com disselenetos de diorganoila utilizando etanol como solvente. O método desenvolvido utiliza condições de reação brandas e foi eficiente para a síntese de diferentes 3-organosselânio-benzo[*b*]calcogenofenos com rendimentos bons a excelentes.



X = O, S, Se, NMe

R = Arila, alquila, SePh; R¹ = Arila, heteroarila, alquila

R² = metila, butila, H

Esquema 1. Síntese de benzo[*b*]calcogenofenos.

Conclusões

De forma geral, obteve-se o desenvolvimento de um método que vai de acordo com os princípios da química verde, sendo possível a síntese de diferentes benzo[*b*]calcogenofenos. Além disso, comprova-se que o TCCA pode ser facilmente utilizado como bom gerador de espécies eletrofílicas de selênio *in situ* para reações de síntese orgânica.

Agradecimentos

Agradecemos ao suporte financeiro fornecido pelos órgãos de fomento CAPES, CNPq e FAPERGS, assim como a Universidade Federal de Pelotas.

Referências e notas

- (1) Mahmoud, A. B. A.; Kirsch, G.; Peagle, E. *Curr. Org. Synth.*, **2017**, *14*, 1091.
- (2) Wei, Y.; Tao, Y.; Kong, Z.; Liu, L.; Wang, J.; Qiao, W.; Ling, L.; Long, D. *Energy Storage Mater.* **2016**, *5*, 171.
- (3) a) Liang, Y.; Tao, Z.; Chen, J. *Adv. Energy Mater.* **2012**, *2*, 742. b) Choi, N. M.; Chen, Z.; Freunberger, S. A.; Ji, X.; Sun, Y. K.; Amine, K.; Yushin, G.; Nazar, L. F.; Cho, J.; Bruce, P. G. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, *51*, 9994.
- (4) Mohankumar, M.; Chattopadhyay, B.; Hadji, R.; Sanguinet, L.; Kennedy, A. R.; Lemaur, V.; Cornil, J.; Fenwick, O.; Samori, P.; Geerts, Y. *ChemPlusChem* **2019**, *84*, 1263.
- (5) a) Li, J.; Pu, K. *Chem. Soc. Rev.* **2019**, *48*, 38. b) Okamoto, T.; Yu, C. P.; Mitsui, C.; Yamagishi, M.; Ishii, H.; Takeya, J. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 9083.

CARACTERIZAÇÃO DO ÓLEO ESSENCIAL DE *Curcuma longa* LINN. OBTIDO DOS RIZOMAS DA PLANTA COMERCIALIZADOS EM PELOTAS.

Vitória Lopes Rodrigues^{1,*} (IC), Victória de Castro Armani¹ (IC), Nicole Cristina Martins Rocha¹ (PG), Daniela Hartwig de Oliveira¹ (PQ), Raquel Guimarães Jacob¹ (PQ).

¹Laboratório de Síntese Orgânica Limpa – LASOL, CCQFA, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, Rio Grande do Sul, Brasil.
 *vitorialopesr02@gmail.com

Palavras Chave: *Cúrcuma*, açafão, óleo essencial, caracterização, terpenos.

Introdução

A *Curcuma longa* L., pertencente à família *Zingiberaceae*, é uma espécie original da Ásia, cuja planta também é popularmente conhecida por açafão-da-terra. O óleo essencial (OE) da cúrcuma pode ser obtido a partir do rizoma da planta e, em sua maioria, é composto por terpenoides, principalmente os sesquiterpenos Ar-, α - e β -turmeronas. As atividades biológicas já relatadas destes compostos são: antioxidante, antimutagênica, antimicrobiana, por exemplo.¹

Desta forma, o presente trabalho tem como objetivo extrair e caracterizar quimicamente o OE dos rizomas de cúrcuma vendidos no comércio de Pelotas, visando identificar os sesquiterpenos majoritários.

Resultados e discussão

O OE da cúrcuma foi extraído através da técnica destilação por arraste a vapor dos rizomas frescos ralados, proporcionando um rendimento de 0,92%, correspondendo a 3,33 g. Este resultado fica de acordo com o relatado na literatura para extração do OE partindo de rizomas frescos.²

Através da análise por CG-MS, foi possível caracterizar um total de onze compostos voláteis presentes no óleo essencial (Tabela 1), verificando-se que as turmeronas representam 53% do OE, sendo 12,99% da Ar-turmerona **A**, 30,6% da α -turmerona **B** e 9,22% da β -turmerona **C**. Com esse resultado, determinou-se que a α -turmerona é o constituinte majoritário do óleo em estudo, evidenciando a diferença na composição quando comparado à plantas cultivadas na Bahia, na qual o composto majoritário é a Ar-turmerona (31,31%).³

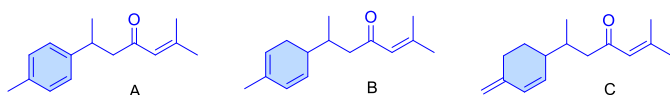


Figura 1. Estrutura das turmeronas

Tabela 1: Relação dos compostos identificados no OE da cúrcuma.

Pico	t_r (s)	Similaridade (%)	Área do pico (%)	Composto
1	8.27	92%	9,81	Eucaliptol
2	26.85	88%	4,09	Ar-curcumeno
3	27.55	92%	11,02	α -zingibereno
4	28.15	78%	1,44	β -bisaboleno
5	28.65	93%	9,44	β -sesquifelandreno
6	33.30	93%	12,99	Ar-turmerona
7	33.68	95%	30,60	α-turmerona
8	34.53	90%	6,02	3,7-Ciclododecadien-1-ona
9	34.84	92%	9,22	β-turmerona
10	36.40	74%	1,59	Biciclo[3.1.0]hexan-3-ona, 4-metil-1-(1-metiletil)
11	37.27	73%	3,78	1,1-dimetil-3,4-bis(prop-1-en-2-il)ciclohexano

* t_r : tempo de retenção

Conclusões

Considerando o que foi estudado até o momento, conclui-se que o OE em estudo tem como principal constituinte a α -turmerona. Entretanto, pretende-se ainda realizar a extração do OE dos rizomas secos para um estudo comparativo tanto em termos qualitativos, quanto quantitativos. Este estudo comparativo também será estendido para avaliação do OE obtido comercialmente.

Agradecimentos

Os autores são gratos ao CNPq, FAPERGS e CAPES pelo apoio financeiro.

Referencias e notas

- (1) (a) Filho, A. B. C.; et al. *Ciência Rural*, **2004**, *34*, 1021-1026. (b) Govindarajan, V. S.; et al. *Crit Rev Food Sci Nutri*, **1980**, *12*, 199-301. (c) Jayaprakasha, G. K.; et al. *Trends Food Sci Technol*, **2005**, *16*, 533-548.
- (2) (a) Ferri, P. H.; et al. *Revista Panorâmica online*, **2020**, *3*. (b) Fahmy, N. M.; et al. *Plants*, **2023**, *12*, 1785.
- (3) Guimarães. A.; et al. *Quim Nova*, **2020**, *43*, 909-913.

EFEITO DA CONCENTRAÇÃO DO EXTRATO ENZIMÁTICO NA HIDRÓLISE DA CELULOSE

Estêvan Casarin Pereira (IC)^{1*}, Daniel da Rosa Couto (IC)¹, Victor Duarte Pedroso (IC)¹, Jander Luis Fernades Monks (PQ)¹, Ricardo Peraça Toralles (PQ)¹

*estevan.casarin@gmail.com

¹Laboratório de Bioquímica Aplicada, Departamento Engenharia Química, IFSUL, Campus Pelotas, Pelotas- RS.

Palavras Chave: Hidrólise, Celulase, Celulose, lignocelulósico, enzimas comerciais, atividade enzimática.

Introdução

A celulose é o recurso renovável mais abundante. Além disso, tem um alto potencial para produção em massa de biocombustíveis e produtos químicos renováveis, porém encontra-se associada na biomassa lignocelulósica com alta resistência à hidrólise enzimática direta e ao ataque microbiano¹. Assim, a produção economicamente viável de açúcares fermentáveis visando bioetanol apresenta as seguintes etapas, resumidamente: pré-tratamento, hidrólise da celulose e fermentação^{1,2}. Na etapa da hidrólise enzimática existem alguns fatores que influenciam a cinética da celulase, tais como: pH, temperatura, concentração do substrato, concentração do extrato enzimático, entre outros². De modo geral, as celulases desenvolvem ótima atividade em pH de 5 a 50°C, porém promotores e inibidores da hidrólise sempre devem ser bem avaliados. As características físico-químicas do substrato lignocelulósico como porosidade, cristalinidade, e o teor de lignina e hemicelulose na biomassa também afetam a etapa da hidrólise^{1,2}. Neste trabalho, visando contornar esse problema, trabalhamos somente com celulose como substrato e o **objetivo** foi estudar o efeito da concentração do extrato enzimático na hidrólise da celulose usando três celulases comerciais diferentes: Cellic Ctec 3, Sigma Aldrich, BM N 800.

Resultados e discussão

Na Figura 1, demonstra-se o efeito da variação na concentração de três celulases comerciais na hidrólise enzimática de 57 mg de celulose, realizada a 50°C por 60 minutos, utilizando 2,0 mL de solução tampão pH 4,75, e 1,0 mL do extrato enzimático diluído para um teor de proteínas entre 0,1 e 1 mg mL⁻¹. A avaliação foi realizada em relação a atividade enzimática máxima observada, referente a celulase Cellic Ctec 3 na concentração de 0,3%, que equivale a (0,312 ± 0,016 μmol min⁻¹ mL⁻¹) e (0,370 ± 0,019 μmol

min⁻¹ mg⁻¹). Para essa concentração o valor não foi significativamente (p=0,05) superior a concentração 0,4% do mesmo extrato e nem a enzima Sigma Aldrich na diluição de 0,4%. Por outro lado, a celulase BM N 800 exibiu sua atividade máxima a uma concentração de 50%.

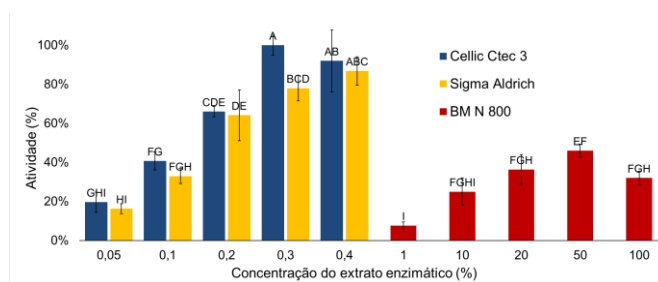


Figura 1. Efeito da concentração de três celulases comerciais na atividade enzimática, celulases: Cellic Ctec 3, Sigma Aldrich, BM N 800.

Conclusões

A enzima Cellic Ctec 3, na diluição de 0,3% v/v, demonstrou maior atividade enzimática entre as três propostas nesse estudo e é a escolhida para posterior estudo de produção de açúcares fermentáveis visando bioetanol. Além disso, trata-se de uma enzima de uso industrial, amplamente disponível e apresenta custo mais vantajoso em comparação à celulase Sigma Aldrich e um menor volume de extrato para se obter a atividade ótima.

Agradecimentos

FAPERGS e IFSUL.

Referências e notas

- (1) Khodaverdi, M.; Jeihanipour, A.; Karimi, K.; Taherzadeh, M. J. Kinetic modeling of rapid enzymatic hydrolysis of crystalline cellulose after pretreatment by NMMO.
- (2) Taherzadeh, M.; Karimi, K. Enzyme-based hydrolysis processes for ethanol from lignocellulosic materials: A Review. *BioResources*, 2 (4), 707-738, 2007.

Síntese e avaliação da atividade antiespasmódica de derivados ftalimídicos.

Laura V. B. du V. França (IC), Daniele Regina Sonza (PG), Theodoro Marcel Wagner (PQ), Rogério Corrêa (PQ), Rita de Cássia Vilhena da Silva (PQ), Anelize Dada (PG), Mariana Zanovello (PG), Thaise Boeing (PQ), Priscila de Souza (PQ).

¹Laboratório de Síntese Orgânica -UNIVALI, ²Laboratório de Farmacologia Cardiovascular - UNIVALI, ³Laboratório de Instrumentação Analítica - UNIVALI.

Palavras Chave: imidas cíclicas, ftalimidas, efeito antiespasmódico

Introdução

Imidas carboxílicas monocíclicas podem ser consideradas como compostos derivados dos ácidos dicarboxílicos correspondentes e amônia, com consequente eliminação de água. O anel imídico é formado por dois grupamentos carboxílicos intercalados de um lado por um átomo de nitrogênio e de outro lado por um grupamento hidrocarbônico. As ftalimidas são imidas cíclicas derivadas do ácido ftálico (ou anidrido ftálico) e a elas são atribuídos diferentes efeitos biológicos, como os efeitos analgésico, anti-inflamatório, antimicrobiano, antitumorigênico, entre outros¹.

No intuito de se investigar a ocorrência de efeito antiespasmódico foi sintetizada uma série de compostos ftálicos (Figura 1), uma vez que tal efeito ainda não foi reportado na literatura com relação a essa classe de compostos.

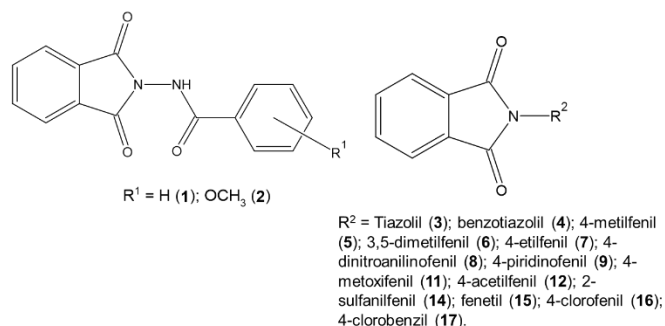


Figura 1. Estruturas químicas dos compostos sintetizados.

Os compostos foram sintetizados com quantidades equimolares de anidrido ftálico e bases nitrogenadas, como anilinas e fenilhidrazinas substituídas, em meio de ácido acético (refluxo). A caracterização dos compostos obtidos foi feita por ¹H RMN; ¹³C RMN; FT-IR e MS. Os ensaios biológicos para a avaliação do efeito antiespasmódico utilizaram ratos wistar machos (CEUA/Univali: n^o 035/22)².

Resultados e discussão

Na presença de veículo, a adição de concentrações cumulativas de acetilcolina (10 nM a 1 mM) induziu uma resposta contrátil máxima de 2,48 ± 0,09 g. Em contrapartida, a incubação de alguns compostos foi capaz de reduzir a contração induzida pela acetilcolina. Outros compostos, no entanto, não causaram alterações significativas na resposta à acetilcolina. Em relação à resposta de relaxamento, todos os 15 compostos apresentaram ação relaxante no jejuno isolado de rato pré-contraído por acetilcolina, diferindo na eficácia de suas respostas máximas.

Conclusões

Os compostos 01, 02, 03, 04, 06 e 15 foram capazes de reduzir a contração induzida pela acetilcolina; os compostos 05, 07, 08, 09, 11, 12 e 14 não causaram nenhuma alteração significativa na resposta à acetilcolina; Em relação à resposta de relaxamento, os compostos mais eficazes (ou seja, aqueles que promoveram efeito máximo superior a 60%) foram 01, 02, 03, 07 e 17; Destacam-se os compostos 01, 02 e 03 por serem capazes tanto de reduzir a contração induzida pela acetilcolina quanto promover o relaxamento.

Agradecimentos

FAP (UNIVALI); FAPESC, CAPES

Referências e notas

- (1) CECHINEL FILHO, Valdir; CAMPOS, Fátima de; CORRÊA, Rogério. ASPECTOS QUÍMICOS E POTENCIAL TERAPÊUTICO DE IMIDAS CÍCLICAS: UMA REVISÃO DA LITERATURA. *Química Nova*, Florianópolis, v. 26, n. 2, p. 230-241, jul. 2003.
- (2) MENDEL, Marta; CHIOPECKA, Magdalena; DZIEKAN, Natalia; KARLIK, Wojciech. Antispasmodic effect of selected Citrus flavonoids on rat isolated jejunum specimens. *European Journal Of Pharmacology*, [S.L.], v. 791, p. 640-646, nov. 2016.

METODOLOGIA LIVRE DE SOLVENTES E METAIS PARA A CALCOGENAÇÃO DE 2H-INDAZÓIS USANDO I₂/DMSO COMO SISTEMA CATALÍTICO

Nicole Cristina Martins Rocha^{1,*} (PG), Daniela Hartwig de Oliveira¹ (PQ), Raquel Guimarães Jacob¹ (PQ).

¹Laboratório de Síntese Orgânica Limpa – LASOL, CCQFA, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, Rio Grande do Sul, Brasil.
*nicolecmrocha@outlook.com

Palavras Chave: Heterociclos, indazóis, organocalcogênicos, iodo, DMSO.

Introdução

Os heterociclos nitrogenados constituem uma classe de compostos muito importante na ciência, já que estão presentes em uma grande quantidade de medicamentos comerciais. Dentro desta classe, os indazóis recebem destaque por causa da vasta gama de atividades biológicas que estas moléculas apresentam, como anti-inflamatória, antimicrobiana, anti-HIV, anti-hipertensiva, antitumoral e antifúngica, razão pela qual este núcleo também é encontrado em vários medicamentos comerciais (Figura 1).¹

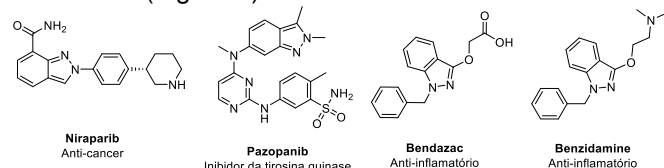


Figura 1: Medicamentos comerciais contendo o núcleo indazol.

Os organocalcogênicos também despertam o interesse científico por apresentarem atividades biológicas muito relevantes como antioxidante, anti-inflamatória e antitumoral, em especial aqueles que contém os átomos de selênio, enxofre e telúrio em sua estrutura. Além disso, estes compostos são bastante versáteis e podem ser aplicados como substrato em reações de biotransformação e como organocatalisadores, com alta seletividade, baixo custo e economia de átomos.²

Deste modo, o objetivo deste trabalho é a calcogenação do núcleo 2H-indazol utilizando uma metodologia simples e eficiente, visando ampliar o potencial farmacológico destes compostos.

Resultados e discussão

Após um estudo de otimização das condições reacionais, a melhor condição para esta reação foi 0,3 mmol de **1**, 0,15 mmol de **2**, 5 mol % de iodo molecular como catalisador, 3 equivalentes do agente oxidante DMSO, com um tempo reacional de 22 horas a 100 °C. Na sequência, esta metodologia se mostrou eficiente

para diferentes substituintes nos materiais de partida, conforme representado na Figura 2.

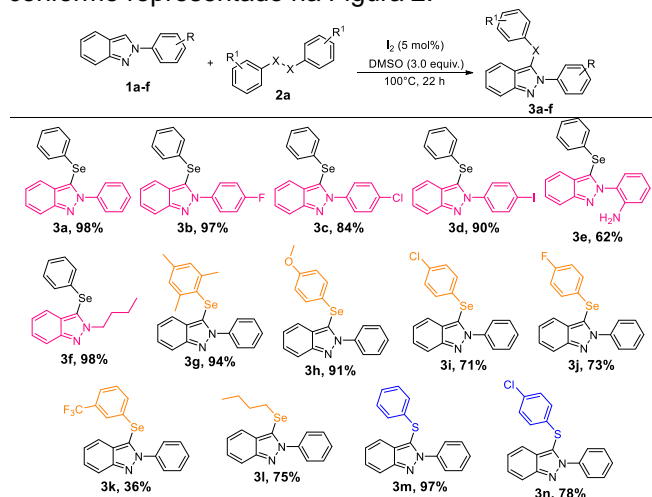


Figura 2: Variação do escopo reacional.

Conclusões

De acordo com a metodologia proposta neste trabalho foi possível sintetizar 15 exemplos de 3-(organocalcogenil)-2H-indazóis a partir de iodo molecular e DMSO como sistema catalítico, sem a necessidade de solventes ou catálise metálica.

Agradecimentos

Os autores são gratos ao CNPq, FAPERGS e CAPES pelo apoio financeiro.

Referências e notas

- (1) (a) SHAO, L.; *et al. Org. Chem. Front.*, **2019**, *16*, 2999-3041. (b) HASSAN, W.; *et al. Arab. J. Chem.*, **2019**, *12*, 1268-1276.
- (2) (a) ZHANG, S. G.; *et al. Molecules*, **2018**, *23*, 2783-2823. (b) DONG, J.; *et al. ChemMedChem*, **2018**, *13*, 1490-1507. (c) LENARDAO, E. J.; *et al. Curr. Green Chem.*, **2016**, *3*, 4-17.

Extração de Matéria Orgânica de Rochas Carbonáticas: Avaliação de Técnicas Baseadas em Solventes

Jéssica T. de Lima^{1,2}(PG)*, Anelize M. B. Rumbelsperger²(PQ), Leonardo F. Cury²(PQ) e Caroline R. M. D'Oca¹(PQ).
*jess.delima@ufpr.br

(1) Grupo de Pesquisa em Síntese Orgânica Medicinal e Agroquímica (SOMA), Dpto. de Química, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil;

(2) Laboratório de Análise de Minerais e Rochas – LAMIR, Dpto. de Geologia, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil.
Palavras Chave: Biomarcadores, Rochas carbonáticas, Técnicas de extração.

Introdução

As rochas carbonáticas, comumente encontradas em formações geológicas, são um tipo de rocha sedimentar composta predominantemente de minerais calcita e dolomita. Durante o processo de precipitação, essas rochas têm a capacidade de associar compostos orgânicos, formando o que são chamados de organominerais.¹ Biomarcadores geoquímicos orgânicos são moléculas preservadas nos registros geológicos, resultantes da diagênese e da degradação térmica de biomoléculas. Fornecem um registro direto da produtividade primária e podem ser usados como indicadores, permitindo a reconstrução das condições físicas, biológicas e químicas de cenários pretéritos.² Ácidos graxos, *n*-alcanos, *n*-álcoois, esteróis e terpenóides são exemplos de biomarcadores encontrados neste tipo de matriz.³ Este trabalho teve como objetivo, avaliar o uso de etanol como solvente extrator em rochas carbonáticas, variando as técnicas de agitação magnética e ultrassonicação, a fim de identificar metodologias que sejam eficientes e ambientalmente amigáveis para estudo de biomarcadores.

Resultados e discussão

Inicialmente, realizou-se uma avaliação da extração utilizando etanol como solvente, variando-se a técnica de agitação entre ultrassonicação (U) e agitação magnética (AM), por 20 minutos a temperatura de 25 °C, em triplicata (Figura 1).

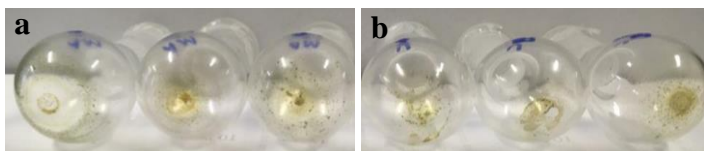


Figura 1. Ilustração de MO extraída via a) AM e b) U.

Em seguida, o ciclo foi repetido por até 2 vezes, prolongando o tempo de agitação em um total de 40 e 60 minutos. Os resultados médios da massa recuperada para cada técnica de extração e tempo de agitação são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Comparação da eficácia de extração por AM e U.

Método	AG	AG	AG	U	U	U
Tempo total de agitação (min)	20	40	60	20	40	60
Média (%)	0,27	0,41	0,49	0,18	0,30	0,38
CV (%)	24,0	13,9	12,0	13,3	15,2	13,0

* 1 g de material rochoso empregado, AM ou U por 20, 40 e 60 min, 25 °C, centrifugação a 2000 rpm por 15 min, CV = coeficiente de variação.

De acordo com os resultados, os experimentos conduzidos empregando AM levaram a uma maior recuperação de matéria orgânica, em massa. As frações estão em fase de caracterização por Ressonância Magnética Nuclear (RMN) e Cromatografia Gasosa (CG), fornecendo informações qualitativas sobre os biomarcadores extraídos. Os próximos passos envolvem avaliar MeOH, DCM, hexano e misturas DCM:MeOH como solventes e uso de radiação por microondas.

Conclusões

A extração de matéria orgânica empregando etanol como solvente a partir de rochas carbonáticas revelou resultados promissores. Embora ainda preliminares, a AM demonstrou ser superior à U na extração desses compostos. Estudos envolvendo outros solventes, bem como a caracterização dos compostos extraídos estão em andamento.

Agradecimentos

À CAPES, CNPq, Fundação Araucária e Petrobrás (processo 2022/00028-1/).

Referências e notas

- (1) Summons, R. E.; Welander, P. V.; Gold, D. A. *Nat Rev Microbiol* 20, 174–185, 2022. (2) Jarvis, I.; Lignum, J. S.; Gröcke, D. R.; Jenkyns, H. C.; Pearce, M. A. *Paleoceanography*. v. 26, PA3201, 2011. (3) Tareq, S. M.; Kitagawa, H.; Ohta, K. *Quaternary International*. v. 229, n. 1, 2011.

Síntese dos 3-(Benzo[C][1,2,5]Calcogenodiazol-5-il)-5-(Ariletinil)-1,2,4-Oxadiazóis Derivados de Arilamidoximas e dos Ácidos 3-Arilpropiólicos

Felipe da S. Pulgati¹ (IC)*, Paola C. Pereira¹ (PG); João C. P. Mayer¹ (PG); Oscar E. D. Rodrigues¹ (CO); Luciano Dornelles¹ (O)

e-mail: pulgati.felipe@acad.ufsm.br

¹ LabSelen-NanoBio – Departamento de Química/CCNE, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, RS, Brasil.

Palavras Chave: 1,2,4-Oxadiazóis, 1,2,5-Benzocalcogenodiazóis, Ácidos fenilpropiólicos, Docking molecular.

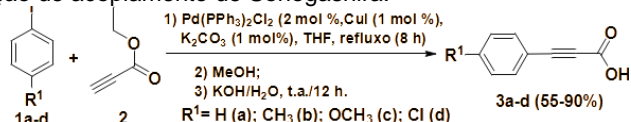
Introdução

A importância da química de heterociclos nitrogenados, tem crescido nos últimos anos, possibilitando a conexão entre muitas áreas interdisciplinares da ciência, destacando-se em química orgânica sintética¹ e principalmente na área farmacêutica,² devido a sua ampla gama de aplicabilidade em novas estruturas moleculares. Um dos objetivos deste trabalho foi explorar a síntese dos 1,2,4-oxadiazóis 3,5-dissubstituídos (**12-14**): funcionalizados com os 1,2,5-benzocalcogenodiazóis (**9-11**) na posição 3 do anel 1,2,4-oxadiazólico e as ariletinilas (**3a-d**) na posição 5.

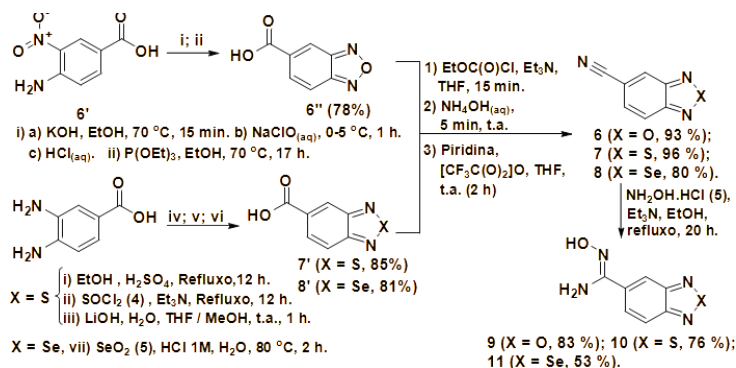
Resultados e discussão

Os materiais de partida, os ácidos 3-arylpropílicos (**3a-d**) e as amidoximas (**9-11**) foram preparados conforme apresentados nos Esquemas 1 e 2, respectivamente.

Esquema 1. Reação de obtenção dos ácidos 3-arylpropílicos via reação de acoplamento de Sonogashira.

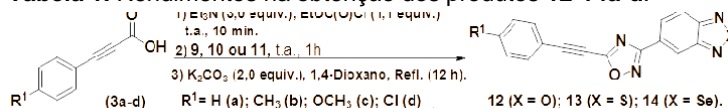


Esquema 2. Síntese das amidoximas (**9-11**).



Os produtos foram obtidos através da reação entre as amidoximas com o ácido 3-arylpropílico correspondente em um procedimento *one pot*, sendo purificados por coluna cromatográfica em sílica gel. Estudou-se a influência dos substituintes R¹ tanto de grupos doadores como retiradores de elétrons, bem como o calcogênio presente no anel 1,2,5-benzocalcogenodiazólico (Tabela 1), onde não observou-se uma variação significativa nos rendimentos.

Tabela 1. Rendimentos na obtenção dos produtos **12-14a-d**.



Produto (Rendim. %)	Produto (Rendim. %)	Produto (Rendim. %)
12a (71)	13a (75)	14a (66)
12b (72)	13b (68)	14b (61)
12c (56)	13c (69)	14c (72)
12d (63)	13d (65)	14d (56)

Os compostos obtidos foram caracterizados por RMN de ¹H e ¹³C e espectrometria de massas, sendo avaliados por um estudo de *docking* com a proteína tubulina, e um análogo sintético de podofilotoxina. Estes compostos apresentaram valores de energias favoráveis de -7,5 a -7,9 kcal/mol.

Conclusões

Os produtos são inéditos e foram obtidos em bons rendimentos (56-75%), onde serão submetidos a ensaios de espectroscopia UV-Vis, de voltametria cíclica e de bioatividade (atividade antitumoral e antioxidante).

Agradecimentos

UFSM, CNPq, CAPES.

Referências e notas

- (1) a) Dornelles, L. *Arkivoc* **2015**, vii, 131. b) Taylor, A. P. et al. *Org. Biomol. Chem.* **2016**, 14, 6611. c) Wolf, L. *Tetrahedron* **2021**, 91, 132222.
- (2) a) Boström, J. et al. *J. Med. Chem.* **2012**, 55, 1817. b) Ruberte, A. C. et al. *Eur. J. Med. Chem.* **2018**, 157, 14. c) de Giacometti, M. et al. *Exp. Parasitol.* **2023**, 253, 108601.

Síntese de di-hidropirimidinas em reatores supramoleculares

Camila Silva de Souza^{1*} (IC), Fernanda Caroline Sousa¹, (IC) Simone Schneider Amaral¹ (PQ).

*camila.souza@ufcspa.edu.br

¹ UFCSPA, Laboratório de farmacociências, prédio 3. Av. Sarmiento Leite, 245.

Palavras Chave: Química verde, Biginelli, Tween 20.

Introdução

A maioria das reações em fase líquida utiliza solventes orgânicos voláteis e potencialmente tóxicos. Portanto, é importante buscar solventes menos agressivos e igualmente, ou mais, eficazes. A água é uma alternativa viável, mas pode ser incompatível com certos reagentes, dificultando a separação de produtos e a reutilização de catalisadores. Meios reacionais pouco convencionais, como meios emulsionados, podem ser abordagens ambientalmente mais adequadas. O presente estudo utilizou Tween 20 como meio reacional para as reações de Biginelli, conforme é possível observar na imagem 1, e etanol para fins de comparação. Essas reações apresentam relevância na indústria farmacêutica e, por ser “one-pot”, contemplam o caráter ambiental desejado.

Resultados e discussão

Após estudos bibliográficos¹, foram estabelecidas as condições reacionais iniciais, com alterações posteriores conforme a evolução dos parâmetros: eficiência, tempo, temperatura e rendimento reacional.

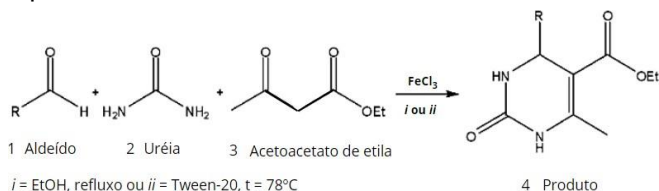


Figura 1. Reação demonstrativa da síntese de Biginelli.

Aldeído	R
1a,4a	C ₆ H ₅
1b,4b	CH ₃ OC ₆ H ₄
1c,4c	HOC ₆ H ₃ (OCH ₃)
1d,4d	4-(NO ₂)C ₆ H ₄

Tabela 1. Legenda do esquema 1, em que os aldeídos a,b,c e d são respectivamente benzaldeído, 2-metoxibenzaldeído, 3-hidroxi-4-metoxibenzaldeído e 4-nitrobenzaldeído.

As reações foram realizadas com quatro aldeídos descritos na tabela 1. Exceto uma, as demais sínteses foram aquecidas sob refluxo com temperatura aproximada de 78°

C. Todas as reações foram realizadas com catalisador de ferro, Cloreto Férrico. O isolamento dos produtos foi feito por filtração a vácuo e a recristalização em etanol. É possível observar na tabela 2 os principais resultados obtidos a partir da obtenção do meio reacional ideal, em que utilizou-se (além dos parâmetros supracitados) de 3 mL de solvente, aquecimento e agitação.

Aldeído	Solvente	Tempo (h)	Rendimento
1a	EtOH	2h	60,49%
1a	Tween 20	1h	34,83%
1a	Tween 20	9h**	21,28%
1b	Tween 20	3h	59,06%
1b	EtOH	3,5h	80,61%
1c	Tween 20	4,5h	*
1c	EtOH	3,5h	*
1d	Tween 20	6,5h	32,78%
1d	EtOH	8h	24,57%

Tabela 2. Principais resultados. * Rendimentos em processo de obtenção. ** Síntese realizada sem aquecimento para fins de comparação.

Conclusões

Concluiu-se que a utilização de surfactante como meio reacional em reações de Biginelli é promissora. Foram alcançados rendimentos reacionais satisfatórios com redução no tempo das reações, atingindo 50%. Por fim, o método verde de isolamento dos produtos e a reutilização do meio reacional por vários ciclos ainda estão em estudo.

Agradecimentos

As autoras agradecem à agência de fomento, FAPERGS, e à UFCSPA pelo apoio, bolsa PIC, financiamento e infraestrutura.

Referências e notas

- (1) LU, Jun; BAI, Yinjuan. Catalysis of the Biginelli reaction by ferric and nickel chloride hexahydrates. One-pot synthesis of 3, 4-dihydropyrimidin-2 (1H)-ones. *Synthesis*, v. 2002, n. 04, p. 0466-0470, 2002.

Espectroscopia de RMN de ^1H aplicada na Investigação de Equilíbrio de Interconversão de Confômeros de uma Molécula de [2]RotaxanoRamon Ribeiro Prates¹(IC); Fellipe Freire Santos de Farias¹(PG); Gustavo Henrique Weimer¹ (PG); Suzan Kamine Kunz¹ (IC); Marcos Antônio Martins Pinto^{1,*}(PQ)

E-mail: marcos.nuquimhe@gmail.com

¹Núcleo de Química de Heterociclos (NUQUIMHE), Departamento de Química, Centro de Ciências Naturais e Exatas (CCNE), Universidade Federal de Santa Maria (UFSM).

Palavras Chave: Confômeros, [2]Rotaxano, Fumaramida, RMN

Introdução

Um [2]rotaxano pode pertencer à categoria denominada como máquinas moleculares, projetadas para executar tarefas específicas através do controle dos movimentos de seus componentes: o macrocilo e o eixo molecular. A capacidade de estimar a interconversão de confômeros em solução nos conduz ao objetivo principal deste estudo, que é o monitoramento dessa interconversão, através de técnicas de variação de tempo de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de ^1H . Especificamente, o interesse reside no equilíbrio entre confômeros Z/E de um [2]rotaxano contendo a estação fumaramida e possuindo grupos volumosos assimétricos.

Resultados e discussão

A análise de espectroscopia de RMN de ^1H , revelou a existência de três confômeros em solução (Figura 1): A(Z,Z); B(Z,E); C(E,E). No início da análise (t=0min), a relação percentual dos confômeros era de: 92,5% A(Z,Z), 7,5% B(Z,E), 0% C(E,E), o qual corresponde ao ponto mais próximo do estado sólido cristalino.

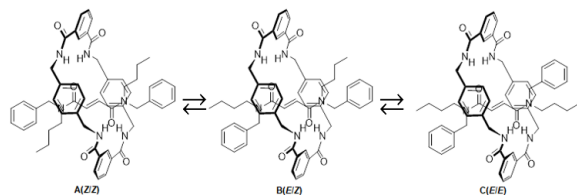


Figura 1. Confômeros observados na molécula de [2]rotaxano.

Conforme o intervalo de tempo aumentava, a interconversão dos confômeros passava a exibir um padrão de aumento e diminuição entre as estruturas (Figura 2). Em solução no ponto final (t=120min), são obtidos valores finais de distribuição de confômeros de 67,75% (Z,Z), 15,25% (Z,E), 1,75% (E,E) devido ao equilíbrio químico das espécies disposto na Tabela 1.

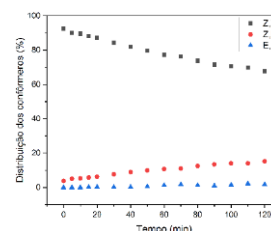


Figura 2. Distribuição confômero em função da variação de tempo.

Tabela 1. Variação de tempo inicial e final e percentagem da distribuição confômero.

Variação de tempo (min.)	Distribuição dos confômero (%)		
	A(Z,Z)	B(E,Z)	C(E,E)
t=0	92.5	3.75	0
t=120	67.75	15.25	1.75

Conclusões

Em conclusão, este estudo proporcionou uma compreensão das características estruturais e conformacionais do [2]rotaxano contendo estação fumaramida em solução. No estado sólido cristalino encontramos o confômero mais estável (Z,Z), cristais contendo as conformações Z,E e E,E não foram obtidos/observados conformes dados da Literatura, corroborando com os dados em solução.

Agradecimentos

Agradecimentos à FAPERGS, CAPES e CNPq.

Referências e notas

- (1) *J. Mol. Liq.* **2023**, 385, 122291.
- (2) *Cryst. Growth Des.* **2023**, 23, 3794.
- (3) *European J. Org. Chem.* **2018**, 2018, 4978.

Rearranjo de Meyer-Schuster na Síntese de (*E*)-1,5-difenilpent-2-en-4-in-1-ona

Caroline S. Gomes¹ (PG), Iago Borges Pedra² (IC), Carolina A. de Oliveira¹ (IC), Juliana Pizzolato dos Santos¹ (IC), Manoela Sacramento¹ (PG), Patrick Teixeira Campos² (PQ), Diego Alves¹ (PQ), Eder J. Lenardão^{1*} (PQ), Juliano A. Roehrs^{2*} (PQ)

¹Laboratório de Síntese Orgânica Limpa - LASOL, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos (CCQFA), Universidade Federal de Pelotas – UFPel, Pelotas, RS, Brasil

²Instituto Federal de Educação Ciência e Tecnologia Sul-rio-grandense – IFSul, Pelotas, RS, Brazil

*E-mail: juliano.roehrs@gmail.com (JAR) e lenardao@ufpel.edu.br (EJL)

Palavras-Chave: Rearranjo de Meyer-Schuster, 1,4-Penteninonas, Isomerização, 1,4-Dialquinóis

Introdução

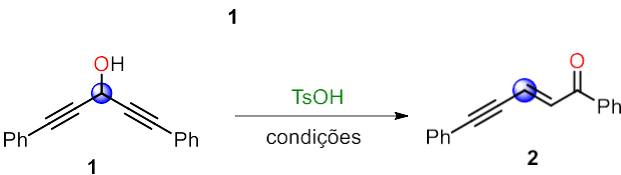
As 1,4-penteninonas conjugadas têm atraído o interesse de pesquisadores por serem consideradas blocos de construção para uma ampla variedade de unidades heterocíclicas, uma vez que as ligações C≡C, C=C e C=O presentes nas 1,4-penteninonas podem ser seletivamente modificadas levando à formação de morfolinas, piridinas, furanos e tiofenos, por exemplo.¹ Para acessar as 1,4-penteninonas, os métodos descritos na literatura utilizam catalisadores de metais de transição, bases fortes, longos tempos de reação, além de envolverem diversas etapas e a formação de subprodutos.² Portanto, é importante desenvolver rotas sintéticas mais limpas e que estejam de acordo com os princípios da química verde.³ Assim, descrevemos aqui os resultados preliminares de uma nova metodologia para a síntese seletiva de 1,4-penteninonas a partir de 1,4-dialquinóis na presença de trietilamina como base e água como solvente.

Resultados e discussão

Inicialmente, realizou-se um estudo de otimização das condições de reação (Tabela 1). A trietilamina foi escolhida como base e a água como solvente na isomerização do 1,4-dialquinol **1**. Ao utilizar trietilamina e água na proporção 1:1 a 100 °C durante 21 h, a 1,4-penteninona **2** foi obtida em 87% de rendimento (linha 1). Reduzindo o tempo de reação para 6 horas, o rendimento aumentou para 97% (linha 2). Na ausência de água, o tempo de reação foi estendido para 22 horas à 80 °C, resultando em um rendimento de 94% (linha 3). Quando a reação foi conduzida à temperatura ambiente, o rendimento diminuiu para 10% (linha 4). Adicionando uma gota do detergente tween 80, o rendimento foi de 96% após 21 h à 80 °C (linha 5). Utilizando um excesso de trietilamina ou água na reação (linha 6 e linha 7), o rendimento permaneceu alto (95 e 97%) com o tempo de reação reduzido para 5 e 6 horas respectivamente. Por fim, fazendo uso de 0,25 mL de trietilamina e 0,25 mL de água na reação, o rendimento foi de 90% (linha 8). Portanto, a melhor condição de reação foi

estabelecida como sendo a da linha 6, onde o produto foi obtido com um rendimento de 95%.

Tabela 1. Otimização das condições de reação.^a



#	TsOH(%)	H ₂ O (mL)	Temp. (°C)	Tempo (h)	Rend. (%)
1	0,5	0,5	100	21	87
2	0,5	0,5	100	6	97
3	1,0	-	80	22	94
4	1,0	-	25	27	10
5 ^b	0,5	0,5	80	21	96
6	0,25	0,25	100	5	95
7	0,75	0,25	100	6	97
8	0,25	0,25	100	5	90

^a Uma mistura de 1,4-dialquinol **1** (0,25 mmol), trietilamina e água foi agitada sob aquecimento. O produto **2** foi purificado por cromatografia em coluna. ^b Foi adicionado 1 gota de tween 80.

Conclusões

Este estudo resultou no desenvolvimento de uma nova rota para o preparo de 1,4-penteninona a partir da isomerização de 1,4-dialquinol mediada por trietilamina. A reação é conduzida em meio aquoso, com excelente seletividade e rendimento. Como perspectivas futuras, serão realizados estudos de escopo e mecanismo da reação.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq, FAPERGS, CAPES, PROPESP-IFRSul e FINEP.

Referências e notas

- (1) (a) Chen, J.; Fana, G.; Liu, Y. *Org. Biomol. Chem.* **2010**, *8*, 4806. (b) Chinta, B. S.; Baire, B. *J. Org. Chem.* **2015**, *80*, 10208. (c) Golovanov, A. A.; Latypova, D. R.; Bekin, V. V.; Pisareva, V. S.; Vologzhanina, A. V.; Dokichev, V. A. *Russ. J. Org. Chem.* **2013**, *49*, 1264.
- (2) Lenardão, E. J.; Freitag, R. A.; Batista, A. C. F.; Dabdoub, M. J.; Silveira, C. C. *Quím. Nova* **2003**, *26*, 123.

EXTRATOS AQUOSOS DE RESÍDUOS AGROINDUSTRIAIS: UMA METODOLOGIA ALTERNATIVA PARA A SÍNTESE DE SELENETOS VINÍLICOS

Lucas M. C. Böhs^{1*} (PG), Andrielli Leitemberger² (FM), Natália E. B. Kuntz³ (PG), Benhur Godoi³ (PQ), Marcelo Godoi¹ (PQ).

¹ Universidade Federal do Rio Grande – FURG, Rua: Barão do Cahy 125. Santo Antônio da Patrulha. CEP: 95500-000. RS.

² Escola Técnica Estadual Monteiro Lobato – CIMOL, Rua: Guilherme Lahm, 1778. Taquara. CEP: 95600-000. RS.

³ Universidade Federal da Fronteira Sul – UFFS, Cerro Largo, RS.

*lucasmartins.furg@gmail.com

Palavras Chave: Resíduos Agroindustriais, WERSA, Organosselênio, Selenetos Vinílicos, Diasterosseletividade.

Introdução

Os selenetos vinílicos são de grande valia para a saúde humana pois possuem relevantes propriedades biológicas e farmacológicas¹. Neste contexto, muitos protocolos sintéticos vêm sendo desenvolvidos para a preparação desses compostos organosselênio sinteticamente importantes². Recentemente, várias metodologias reacionais têm surgido em química utilizando Extratos Aquosos de Resíduos Agroindustriais (EARAs). Neste contexto, o WERSA (sigla em inglês para o termo *Water Extract Rice Straw Ash*) têm sido empregado com sucesso em inúmeras transformações químicas³. Tendo em vista a importância dos selenetos vinílicos e a relevância ambiental da utilização de EARAs em reações químicas, o presente resumo apresentará uma forma alternativa para a síntese de selenetos vinílicos na presença de WERSA.

Resultados e discussão

Inicialmente, para a determinação da melhor condição reacional, foram variadas uma série de parâmetros empregando, como substrato padrão, disseleneto de difenila e fenilacetileno (**Esquema 1**). Através deste estudo, foi possível a obtenção dos selenetos vinílicos desejados com bons rendimentos e boa diasterosseletividade por meio da utilização de WERSA (**Tabela 1**).



Esquema 1. Substrato utilizado e produtos obtidos.

3	16	100	82	16:84	WERSA
4	16	120	93	14:86	WERSA
5	8	120	68	26:74	WERSA
7	20	120	95	17:83	WERSA
8	16	120	91	16:84	WEB ^a
9	16	120	80	13:87	WEPAB ^b
10	16	120	73	49:51	---
11	16	120	66	22:78	ÁGUA ^c

^a Extrato aquoso obtido da casca da banana. ^b Extrato aquoso obtido da casca do mamão. ^c Água Milli-Q®.

Conclusões

Com a utilização do WERSA, um extrato aquoso de resíduo agroindustrial, foi possível sintetizar selenetos vinílicos em bons rendimentos e boa diasterosseletividade. Estudos relacionados ao escopo da reação, bem como o mecanismo, ainda encontram-se em desenvolvimento em nosso laboratório.

Agradecimentos

Agradecemos à **CAPES**, ao **CNPq**, ao **PPGQTA-FURG** e ao **Centro Integrado de Análises (CIA-FURG)**.

Referências e notas

- (1) Lenardão, E. J. *et al.* Synthesis of alkenyl selenides and tellurides using PEG-400. *Arkivoc.* **2009**, 11,221.
- (2) Tanini, D. *et al.* Seleno-Michael Reaction of Stable Functionalised Alkyl Selenols: A Versatile Tool for the Synthesis of Acyclic and Cyclic Unsymmetrical Alkyl and Vinyl Selenides. *Adv. Synth. Catal.* **2019**, 361, 2337.
- (3) Peixoto, M. L. B.; Silva, C. H. L.; Godoi, M. Generation of new carbon-carbon and carbon-heteroatom bonds mediated by agro-waste extracts: a review. *Environ. Chem. Lett.* **2022**, 20, 842.

Síntese de 1,2,3-triazóis usando quitosana como organocatalisador

Sabrina Acosta (IC)¹, Gustavo B. Blödorn (PG)¹, Henrique P. Mota (PG)¹, André R. Fajardo (PQ)¹, Diego Alves (PQ)¹

¹Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Universidade Federal de Pelotas-UFPel, Pelotas, RS, Brasil.

Palavras Chaves: triazóis, quitosana, organocatálise

Introdução

Os triazóis são compostos heterocíclicos que contêm três átomos de nitrogênio e podem ser sintetizados através de reações de cicloadição com azidas orgânicas. Destacam-se por suas notáveis propriedades biológicas, incluindo atividade anticâncer, antibiótica e antifúngica.¹

É de interesse desenvolver metodologias alternativas que substituam a catálise com metais de transição por alternativas não-tóxicas, economicamente viáveis e de fácil manuseio. A quitosana emerge como um potencial organocatalisador alternativo devido à sua fácil obtenção e suas propriedades de biocompatibilidade e biodegradabilidade.²

O presente trabalho visa desenvolver a síntese de 1,2,3-triazóis via reação de cicloadição catalisada pelo biopolímero quitosana.

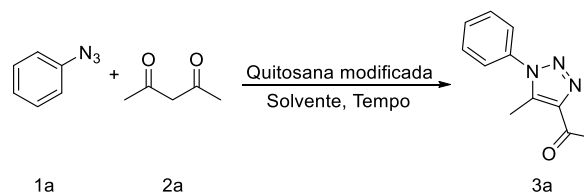
Resultados e discussão

Realizou-se uma série de ensaios visando obter as melhores condições de reação, para isso variou-se alguns parâmetros como o tempo reacional, o solvente empregado e a estrutura da quitosana. Inicialmente realizou-se a reação empregando 0,3 mmol de fenilazida **1a**, 0,33 mmol da pentanodiona **2a**, 0,1 mmol de quitosana e 0,5 mL de dimetilsulfóxido (DMSO) como solvente por um período de 24 horas à 80 °C, obtendo assim o produto de interesse **3a** com 16% de rendimento (tabela 1).

Posteriormente variou-se o tempo e com o aumento no tempo de reação obteve-se um rendimento de 21%. Testou-se ainda a quitosana desacetilada e a decantada em beads (esferas sólidas), obtendo um rendimento de 52% e 65% respectivamente. Por último, utilizando a quitosana decantada em beads e 48 h, variou-se alguns solventes, realizando ensaios com etanol, acetato de etila, PEG-400 e água, atingindo 80% de rendimento quando empregado o acetato de etila.

Serão ainda realizados ensaios futuros visando aumentar o rendimento do método desenvolvido. Ressalta-se ainda que será elaborada a variação do escopo da reação visando comprovar a versatilidade do método.

Tabela 1. Otimização da reação entre a fenilazida **1a** e a 2,4-pentanodiona **2a**^a



Linha	Solvente	Tempo	Rendimento ^b
1	DMSO	24h	16%
2	DMSO	48h	21%
3 ^c	DMSO	48h	52%
4 ^d	DMSO	48h	65%
5 ^d	EtOH	48h	65%
6 ^d	AcOEt	48h	80%
7 ^d	PEG-400	48h	Traços
8 ^d	H ₂ O	48h	Traços

^a Reação realizada utilizando 0,3 mmol de fenilazida **1a**, 0,33 mmol de 2,4-pentanodiona **2a**, 0,1 mmol de quitosana e 0,5 mL de solvente em 80 °C. ^b Rendimento isolado por cromatografia. ^c Utilizado quitosana desacetilada. ^d Utilizado quitosana decantada em beads.

Conclusões

Foi desenvolvido com sucesso um método eficaz de síntese de triazóis, empregando quitosana como catalisador e alcançando rendimentos de até 80%. Serão ainda conduzidos ensaios futuros para ampliar a otimização do processo. Adicionalmente, está prevista a exploração de uma variação no escopo da reação, visando evidenciar a versatilidade do método.

Agradecimentos

Os autores agradecem aos órgãos de fomento CAPES, CNPq, FAPERGS, FINEP e a Universidade Federal de Pelotas.

Referencias e notas

- (1)Matin, M. M.; Matin, P.; Rahman, Md. R.; Ben Hadda, T.; Almalki, F. A.; Mahmud, S.; Ghoneim, M. M.; Alruwaily, M.; Alshehri, S. *Front.Mol.Biosci.* **2022**, 9,1-8
(2)Kadib,E.A.; *ChemSusChem*; **2015**,8, 217-244

Síntese de Novos Derivados Pirazínicos Análogos ao Vorinostat

Guilherme A. Justen (PG),¹ Marcelo G. M. D'Oca* (PQ),¹ Eduardo Q. da Luz (PG),¹ Daniel S. Rampon (PQ)¹
marcelodoca@ufpr.br

Departamento de Química, Programa de Pós-graduação em Química, UFPR. Av. Cel. Francisco H. dos Santos, 210, Curitiba - PR

Palavras Chave: Pirazina, Vorinostat, atividade antitumoral.

Introdução

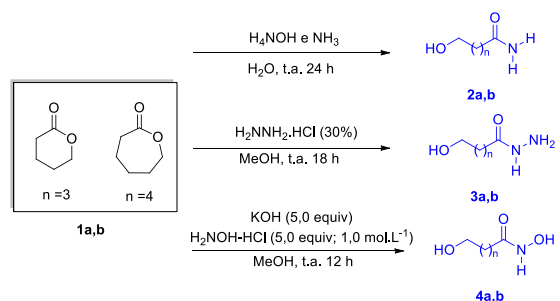
As viroses e as doenças tumorais causam uma preocupação crescente devido à alta variabilidade genética de seus respectivos agentes causadores, bem como a dificuldade do tratamento de muitas dessas patologias. O heterociclo pirazina está presente, por exemplo, presente no Favipiravir que é um eficiente fármaco antiviral que também foi testado para COVID-19, mas com baixa eficiência.¹ O ácido hidroxâmico suberoilânilida (SAHA), Vorinostat (Zolinza®), um inibidor da histona desacetilase foi aprovado pelo FDA em 2006 para o tratamento de manifestações cutâneas em pacientes com linfoma de células T (Leucemia). Dentro deste contexto, o objetivo do presente trabalho é a obtenção de análogos do Vorinostat contendo o núcleo pirazina para posterior avaliação do seu potencial para as atividades antitumoral.

Resultados e discussão

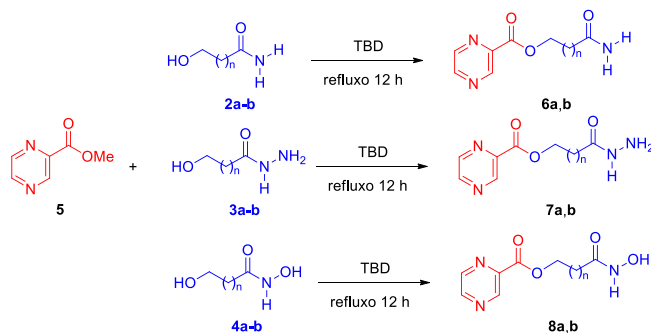
A obtenção dos derivados ocorreu de acordo com a seguinte metodologia. A abertura da valerolactona e caprolactona a partir da aminólise na presença de amina, hidrazina e hidroxilamina **2-4a,b** em bons rendimentos (Esquema 1). Após, utilizando o ácido pirazinoico, que passou por esterificação para obtenção de seu respectivo éster metílico **5**, ocorreu a síntese dos análogos do Vorinostat **6,7a,b** contendo o núcleo pirazina a partir da transesterificação com diferentes álcoois **2-4a,b** na presença de TBD (Esquema 2). A síntese dos derivados **8a,b** contendo o grupo ácido hidroxâmico encontra-se em fase de otimização. Esses produtos são inéditos até o momento e foram devidamente caracterizados via espectrometria de ressonância magnética nuclear de hidrogênio (RMN-¹H) e de carbono (RMN-¹³C).^{2,3}

Agradecimentos

Os autores agradecem à CAPES pela bolsa concedida e ao Centro de RMN da UFPR.



Esquema 1. Rota sintética para obtenção dos álcoois **2-4a,b**



Esquema 2. Síntese dos análogos **2-4a,b** do Vorinostat contendo o núcleo pirazina.

Conclusões

Neste trabalho foi possível sintetizar análogos do Vorinostat contendo o núcleo pirazina e as funções amida e hidrazida. A síntese dos derivados contendo ácido hidroxâmico encontra-se em otimização. As novas moléculas sintetizadas estão sendo encaminhadas para testes biológicos *in vitro* contra diferentes linhagens de células tumorais.

Referências

- (1) Liu, C.; et al. Computational Insights into the Drug Repurposing and Synergism of FDA-approved Influenza Drugs Binding with SARS-CoV-2 Protease against COVID-19. *ACS Central Science* **2020**, *6*, 315.
- (2) Cerniauskeite, D.; et al. Glucosinolate Synthesis: a Hydroxamic Acid Approach. *Eur. J. Org. Chem.*, **2011**, 2293.
- (3) Bolta, M.; De angelis, R. Synthesis of 2-Amino-3-Methoxypyrazine. *J. Heterocyclic Chem.* **1979**, *6*, 193.

Síntese de 1,3-tiazolidin-4-onas utilizando como precursor a 4-(2-aminoetil)benzenossulfonamida.

Taís Pereira Ferreira¹ (PG), Euler Viegas Limas¹ (IC), Claudio dos Santos Nascimento¹ (IC), Wilson Cunico¹ (PQ)

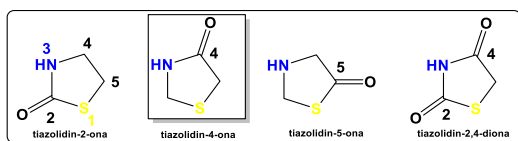
Email: tsispereira@gmail.com

¹Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Universidade Federal de Pelotas, RS, Brasil.

Palavras Chave: Heterociclos, Tiazolidinonas, Sulfonamidas, Química Medicinal.

Introdução

Heterociclos são compostos caracterizados por apresentarem elementos diferentes de carbono no anel como, por exemplo, nitrogênio, enxofre e oxigênio. Muitos desses compostos são encontrados na natureza e apresentam importantes propriedades biológicas. Os compostos heterocíclicos com átomos de nitrogênio e enxofre, principalmente os de cinco e seis membros, são de grande interesse na química orgânica sintética e na química medicinal (**Figura 1**). Dentro desse grupo, existem as tiazolidin-4-onas, heterociclos de cinco membros que possuem em sua estrutura o enxofre na posição 1, o nitrogênio na posição 3 e a carbonila na posição 4 (1). Esses heterociclos podem ser sintetizados através de reações de ciclocondensação *one-pot* entre um aldeído ou cetona, uma amina primária e o ácido mercaptoacético.

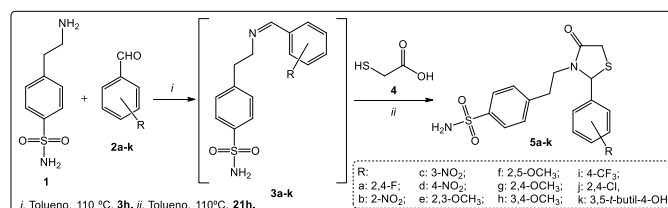
**Figura 1.** Estruturas de alguns heterociclos tiazólicos.

O grupo funcional sulfonamida apresenta uma ampla gama de aplicações biológicas (2). Com base nisso, o objetivo desse trabalho foi obter uma série de compostos contendo esses dois importantes grupos farmacofóricos, a tiazolidinona e a sulfonamida.

Resultados e discussão

A síntese das 1,3-tiazolidin-4-onas ocorreu via multicomponente *one-pot* entre a 4-(2-aminoetil)benzenossulfonamida **1** e os benzaldeídos **2a-k** através da reação de adição a carbonila com a formação *in situ* do intermediário imina **3a-k**. Após 3h de reação, foi adicionado o ácido 2-mercaptoacético **4** e

houve a reação de ciclocondensação para a formação dos produtos **5a-k** com rendimentos de moderados a bons (**Esquema 1**).

**Esquema 1.** Reação de formação das 1,3-tiazolidin-4-onas.

Quando necessário, foi realizada purificação através de uma recristalização com etanol, seguida de filtração a vácuo. Cabe ressaltar que são moléculas inéditas e, portanto, foram caracterizadas por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (CG-EM) e por Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de ¹H e ¹³C, além de HSQC e HMBC, confirmando assim a estrutura dos compostos.

Conclusões

Dado o exposto, pode-se observar através dessa síntese a formação de 11 novas 1,3-tiazolidin-4-onas **5a-k**, com rendimentos de moderados a bons, além disso, futuramente, essa série será avaliada quanto ao seu potencial biológico.

Agradecimentos

Agradecemos a CAPES, CNPq e a UFPel.

Referências e notas

- (1) Alheety, K.A.; Jemel, N. M.; Tomma, H.J.J. *Systematic ReviewPharmacy*. **2020**, 11, 3.
- (2) Tilby, M.J; Willis, M.C. *Taylor & Francis*. **2021**, 16, 11.



SBQ SUL

29º Encontro de Química da Região Sul

Um olhar para o futuro

FÍSICO-QUÍMICA

Sessões Coordenadas

19 de outubro (Quinta-feira) - Sala 300

	Palestrante: Prof. Dr. Giovanni F. Caramori (UFSC) "Overreact, um laboratório in silico: Simulações microcinéticas químico-quânticas automatizadas para reações químicas complexas - implementação em Python"
FSQ 011	Synthesis and characterization of rice husk ash and graphene-based nanocomposites for removing contaminants from water. <i>Mayara Bitencourt Leão (PQ), Leonardo Costa Dias (IC), Chiara Valsecchi (PQ), Jaqueline Pinto Vargas (PQ), Carolina Ferreira de Matos (PQ) - UNIPAMPA</i>
FSQ 033	Estudo da Eficiência e Recuperação dos Fotocatalisadores TiO₂ e Nb₂O₅ na Degradação do Corante Alaranjado de Metila. <i>Brenda Koch (IC), Caroline Maroli (PG), Cristiane Pilissão (PQ), Daniela Z. Mezalira (PQ) - UFSC</i>
FSQ 018	Caracterização Eletrônica de Perovskitas de Haleto quasi-2D com Potencial Aplicação em Células Solares. <i>Danilo N. Silveira (PG), Luis Octavio de Araújo (PG), Marco A. A. Queiroz (IC), Jônatas F. Dalmedico (PG), Maurício J. Piotrowski (PQ), Celso R. C. Rêgo (PQ), Wolfgang Wenzel (PQ), Diego Guedes-Sobrinho (PQ) - UFPR</i>
FSQ 015	Plataforma baseada em nanopartículas de ouro recobertas com N-(2-hidroxi)propil-3-trimetilamônio quitosana para terapia fototérmica e fotodinâmica. <i>Patrícia Sangaletti (PG), Eduardo V. Bergmann (PG), Guilherme N. Vieira (PG), Adolfo H. Junior (PQ), Luis C. Malacarne (PQ), Alfeu Z. Filho (PQ), Adriana P. Gerola (PQ) - UFSC</i>
FSQ 049	Impressão 3D de hidrogéis compósitos contendo biochar de casca de arroz para adsorção de contaminantes orgânicos em água da torneira. <i>Victória Ross Soares (IC), Emilly C. Silva (PG), Andressa B. Nörnberg (PG), André R. Fajardo (PQ) - UFPEL</i>

20 de outubro (Sexta-feira) - Sala 300

	Palestrante: Profa. Dra. Adriana Passarella Gerola (UFSC) "Química supramolecular no desenvolvimento de materiais inteligentes: da Catálise à medicina"
FSQ 046	Hidrogéis nanocompósitos de goma xantana e óxido de grafeno reticulados com a água ruça residual da produção do azeite de oliva e sua aplicação para soluções na agricultura. <i>Gabriele Zuge (PG), Jaqueline P. Vargas (PQ), Carolina Ferreira de Matos Jauris (PQ) - UFSM</i>
FSQ 017	Design de clusters bimetálicos suportados: um estudo ab initio da estabilidade e do potencial catalítico. <i>Gabriel Reynald da Silva (PG), Maurício Jeomar Piotrowski (PQ), Alexandre Cavalheiro Dias (PQ), Henrique Ribeiro da Silva (IC), Diego Guedes-Sobrinho (PQ) - UFPR</i>
FSQ 032	Nanocompósitos de óxido de grafeno reduzido e nanopartículas de níquel: adaptando o tamanho das nanopartículas para melhores sensores eletroquímicos. <i>Anna E. Silva, Lízia A. X. Bulin, Jean C. Bassani, Daniela Z. Mezalira e Eduardo G. C. Neiva - FURB</i>
FSQ 014	Scaffold cerâmico impregnados com fluoreto de cálcio para uso como CIV. <i>Ellen Bitencourt Moreira (IC), Elvio Antônio de Campos (PQ) e Silvia D. de Campos (PQ) - UNIOESTE</i>
FSQ 002	Equipamento para aquecimento e controle de temperatura em reações solvatotérmicas. <i>Antônio A. A. Chepluki (PG), Eric T. Bastos (IC), Fernando Ely (PQ) e Tiago E. A. Frizon (PQ) - UFSC</i>

Sessão de Pôsteres

FSQ 001	Avaliação da superfície de filmes de quitosana modificada e nanofibras de TiO₂. Stella Quadros Fernandes (IC), Thaís Pires dos Santos (IC), Aline Joana R. Wohlmuth Alves dos Santos (PQ) - UFPEL
FSQ 003	Caracterização de micropartículas de quitosana-vanilina para uso alternativo ao microplástico em formulações de higiene e limpeza. Isadora Atrib Garcia (PG), Aline Joana R. Wohlmuth A. dos Santos (PQ), Daniela Bianchini (PQ)- UFPEl
FSQ 004	Síntese e caracterização de nanoformas de TiO₂ para produção de material fotocatalítico Aline Joana R. Wohlmuth A. dos Santos (PQ), Thaís Pires dos Santos (IC), Mariana Inoue Dupinski (IC), Stella Quadros Fernandes (IC), Isadora Atrib Garcia (PG), Henrique Blank (IC), Wladimir H. Flores (PQ) - UFPEl
FSQ 005	Síntese e caracterização de pontos quânticos de carbono a partir do 1,3,6-trinitropireno dopados com cobre e boro. Eric Tavares Bastos (IC), Antônio A. A. Chepluki (PG), Fernando Ely (PQ), Tiago Elias A. Frizon (PQ) - UFSC/ARA
FSQ 006	Avaliação da estabilidade térmica de filmes de quitosana modificada-nanofibras de TiO₂ Thaís Pires Dos Santos (IC), Stella Quadros Fernandes (IC), Isadora Atrib Garcia (PG), Aline Joana R. Wohlmuth A. dos Santos (PQ) - UFPEl
FSQ 007	Síntese, funcionalização e caracterização de pontos quânticos de carbono com nitrogênio e enxofre para aplicação em nanocompósito polimérico. Inara Facin Stefanello (PG), Lara Fernandes dos Santos Lavelli (PQ), Eduardo Zapp (PQ) - UFSM
FSQ 008	Síntese e caracterização de ferritas de níquel para aplicações catalíticas. Pâmela Macchion (IC), Henrique P. Mota (PG), Jaqueline F. de Souza (PG), André R. Fajardo (PQ) - UFPEl
FSQ 009	Efeito dos parâmetros operacionais, massa e vazão de Nitrogênio, na produção de biogás através da pirólise da casca de arroz. Lucas Aldrighi Silveira, Pauline Klasen Oliveira (PQ), Diego Gil de los Santos (PQ), Michele Espinosa da Cunha (PQ), Mirian Dosolina Fusinato (PQ), Pedro José Sanches Filho (PQ) - IFSul
FSQ 010	Como o Polimorfismo Estrutural e os Cátions Controlam o Efeito Bulk Rashba nas Perovskitas de Haleto. Luis O. de Araujo (PG), Danilo N. Silveira (PG), Celso R. C. Rêgo (PQ), Wolfgang Wenzel (PQ), Yohanes Pramudya (PQ), Maurício J. Piotrowski (PQ), Fernando P. Sabino (PQ), Diego Guedes-Sobrinho - UFPR
FSQ 012	Micropartículas de poli(ácido acrílico) recobertas com polietilenoimina contendo íons de Cu²⁺: Um potencial catalisador para a síntese de 3-arilselanilindol. Jaqueline F. Souza (PQ), Thalita F. B. de Aquino (PQ), Ismael C. Bellettini (PQ), Daniela Hartwig (PQ), Raquel G. Jacob (PQ), André R. Fajardo (PQ), Bernardo A. Iglesias (PQ) - UFPEl
FSQ 013	Análise da superfície de biofilmes de quitosana contendo erva-mate e sal de cobre(II). Henrique Blank (IC), Aline Joana R. Wohlmuth A. dos Santos (PQ) - UFPEl
FSQ 016	Filme de β-ciclodextrina/curcumina com potencial uso no tratamento de melanoma. Nicolas Mailahn (IC); Matheus Gularte (PG); Rafael Quadrado (PG); André Fajardo (PQ) - UFPEl
FSQ 019	Desenvolvimento de Eletrocatalisadores de Níquel Suportado em Grafeno Funcionalizado para Potencial Aplicação em Células a Combustível de Líquido Direto. Lízia A. X. Bulin (PG), Brenda Koch (IC), Antônio M. Spricigo (IC), Eduardo G. C. Neiva (PQ), Daniela Zambelli Mezalira (PQ) - UFSC
FSQ 020	Potencial sistema carreador de fármacos baseado em nanopartículas de complexos de polieletrólitos de ácido hialurônico/poli (cloreto de dialildimetilamônio). Tiago Ryan B.

	Quinalia (IC) , Guilherme L. Batista Neto (PG), Rosecler S. Klein (PG), Bruno R. Machado (PG) , Paulo R. Souza (PQ) Alessandro F. Martins (PQ) - UEM
FSQ 021	Otimização de nanopartícula inovadora para o carregamento de biomoléculas. Júlia da Fontoura (IC), Flávia Pires Peña (PG), Tanira Alessandra Silveira Aguirre (PQ) - UFCSPA
FSQ 022	Estudo da Adsorção de Metais na Superfície de Polímeros modificados em Leito Fotoquímico. Caroline Pereira Roldão (PG), Carlos Alberto Severo Felipe (PQ), Felipe Kessler (PQ), Vanessa Bongalhardo Mortola (PQ) - FURG
FSQ 023	Complexo polieletrólítico carregado com ftalocianina de zinco (II) direcionado com biotina como alternativa para terapia fotodinâmica. Renata Dalcanale Araujo (IC), Patrícia Sangaletti (PG), Alfeu Zanotto-Filho (PQ), Adriana Passarella Gerola (PQ) - UFSC
FSQ 025	Investigação da interação entre novos derivados de 2,3-dialcoxifenazina e B-DNA via docking molecular. Magáli Portela Moreira (IC), Tiago Espinosa de Oliveira (PQ) - UFCSPA
FSQ 026	Adsorção de produtos farmacêuticos e de cuidados pessoais (PPCPs) da água utilizando <i>Luffa cylindrica</i> hidrofobicamente modificada. Juliê Silveira da Costa (PG), Débora R. Soares dos Santos (IC), André Ricardo Fajardo (PQ) - UFPel
FSQ 028	Sonda fluorossolvatocrômica derivada do núcleo 2,1,3-benzotiadiazol. Samara de Quadros (PG), Gleiston Gonçalves Dias (PG) e Vanderlei Gageiro Machado (PQ) - UFSC
FSQ 029	Síntese, aut dopagem e deposição de cobre em filmes de TiO₂NT. Leoncio de Mello (IC), Mariana de Souza Sikora (PQ) - UFTPR
FSQ 030	Modelagem de membranas em presença de anti-inflamatórios não esteroidais. Camila Steffani Caovilla (IC), Tiago Espinosa de Oliveira (PQ) - UFCSPA
FSQ 031	Modelagem molecular de nanocompósitos poliméricos aplicados a manufatura aditiva. Gabriel Cattani Ghisio (IC), Tiago Espinosa de Oliveira (PG) - UFCSPA
FSQ 034	<i>Luffa cylindrica</i> graftizada com quitosana como potencial adsorvente para remoção de compostos aniônicos da água. Débora R. Soares dos Santos (IC), Pâmela Macchion (IC), Juliê S. da Costa (PG), André R. Fajardo (PQ) - UFPel
FSQ 035	Modificação das propriedades eletrônicas do MoS₂ por funcionalização com líquido iônico Lidiane da Silva Pluczinski (PG), Cláudio Radtke (PQ) - UFRGS
FSQ 036	Preparação de filmes de PVA/Co₃O₄-TiO₂ por eletrofição para degradação de contaminantes emergentes. Felipe G. Kirchhoff (IC), Gabriel N. Fraga (PG), Douglas C. Dragunski (PQ), Guilherme G. Bessegato (PQ) - UNIOESTE
FSQ 038	Processos de fotodegradação do agrotóxico piraclostrobina e determinação da toxicidade aguda para o organismo-teste <i>Vibrio fischeri</i>. Daniela Cristina Horst Pereira Metz (PG), Cristiane da Silva Barth (PQ), Victor Rodrigues Alves (PG), Andrey Martinez Rebelo (PQ), Lizandra Maria Zimmermann (PQ) - FURB
FSQ 039	Poli(tereftalato de etileno) revestido com multicamadas de polieletrólitos antimicrobiais a base de gelatina/sulfato de condroitina incorporadas com líquidos iônicos. Paulo R. Souza (PQ); Bruno H. Vilsinski (PQ) ; Ariel C. de Oliveira (PQ); Henri S. Schrekker (PQ); Eduardo Radovanovic (PQ); Alessandro F. Martins (PQ); Edvani C. Muniz (PQ) - UEM
FSQ 040	Liberção rápida de paracetamol utilizando membranas eletrofiadas de PVP/VA. Vanessa Rong Jen Chang (PG); Josiane Caetano (PQ), Douglas Cardoso Dragunski (PQ) - UNIOESTE
FSQ 041	Extração de sílica a partir da pirólise da casca de arroz e tratamento ácido. Tallis Fernando Mendes (PG), Danja R. Correa (PG), Claissa Nied Peixoto (IC), Gabriela Pereira Maciel (PQ), José Eduardo Arruda(PQ), Raquel Giulian (PQ), Clarice Steffens(PQ), Rosângela Assis Jacques (PQ) - UFRGS

FSQ 042	<i>Tecidos de PES e mescla PES/CO funcionalizados com nanopartículas de ZnO visando avaliar as propriedades tintoriais e morfológicas.</i> Tatiana C. de Amorim (PG), Renato A. Gomes (G), Thaynna R. Heckert (PG), Lizandra M. Zimmermann (PQ), Ivonete O. Barcellos (PQ) - FURB
FSQ 043	<i>Síntese e Caracterização de Hidrogéis Híbridos Baseados em Grafeno e Nanotubos de Carbono.</i> Gabriel F. Murillo (IC), Carolina F. M. Jauris (PQ) - UFSM
FSQ 044	<i>NANOCOMPÓSITO DE HIDROXIAPATITA EM MATRIX DE POLIÉSTERS.</i> Samuel Willian Gregório (IC), Marcia Margarete Meier (PQ), Daiara Floriano da Silva (PQ) - UDESC
FSQ 045	<i>Síntese de Zeólita sem direcionador diretamente das cinzas de casca de arroz.</i> Shayla Santos Lopes (IC), Mirian Dosolina Fusinato (PG), Timóteo Casarin Pereira (IC) , Pedro José Sanches Filho (PQ) , Diego Gil de los Santos (PQ), Daniel Assumpção Bertuol (PQ), Adreano Gomes Spessato (PG), Camila Ottonelli Calgaro (PQ) - UFPel
FSQ 047	<i>Incorporação de óxidos de ferro em quitosana para estudo de adsorção.</i> Bruna Cristina Badalotti (IC), Reinaldo Aparecido Bariccatti (PQ) - UNIOESTE
FSQ 048	<i>Estudo da Degradação da Rodamina B e Avaliação da Influência da Acidez do Meio.</i> Giovanna Vulcão Colares (IC), Brenda Koch (IC), Caroline Maroli (PG), Daniela Zambelli Mezalira (PQ) - UFSC
FSQ 049	<i>Impressão 3D de hidrogéis compósitos contendo biochar de casca de arroz para adsorção de contaminantes orgânicos em água da torneira.</i> Victória Ross Soares (IC), Emilly C. Silva (PG), Andressa B. Nörnberg (PG), André R. Fajardo (PQ)

Avaliação da superfície de filmes de quitosana modificada e nanofibras de TiO₂

Stella Quadros Fernandes¹ (IC)*, Thaís Pires dos Santos² (IC), Aline Joana Rolina Wohlmuth Alves dos Santos³ (PQ).
stellaquadrosf@gmail.com

^{1,2}Universidade Federal de Pelotas (UFPel), Curso de Bacharelado em Química

³ UFPel, Centro de Ciências Químicas Farmacêuticas e de Alimentos (CCQFA)

Palavras Chave: nanofibras, TiO₂, MEV, EDS, quitosana

Introdução

A quitosana (QUI) é um tipo de polissacarídeo polimérico que possui diversas aplicações, devido, principalmente, à presença de grupos amino livres protonáveis em meio ácido¹. Uma dessas aplicações é como meio de suporte para compostos inorgânicos, como o dióxido de titânio (TiO₂), principalmente na forma nano, com aumento significativo em sua área superficial². A forma de nanofibras ainda evidencia o incremento de direcionamento do material, que pode resultar em eficiência nas aplicações. Os filmes de QUI-TiO₂ são versáteis no tratamento de efluentes, implantes médicos e indústria alimentícia². Além do mais, nanopartículas de TiO₂ suportadas em polímero de quitosana mostram-se adequadas no tratamento de águas poluídas por meio da fotocatalise³. A modificação da estrutura da quitosana, ou seja, a reticulação, pode tornar os filmes mais rígidos e estáveis às aplicações desejadas, a exemplo da reticulação com glutaraldeído (GA)⁴. Desta forma, o objetivo deste trabalho foi avaliar a superfície de filmes de TiO₂-quitosana modificada por meio de microscopia eletrônica de varredura (MEV) e espectroscopia de energia dispersiva (EDS), fazendo uso de quitosana previamente sintetizada pelo grupo¹ e amostra de TiO₂ previamente purificada por calcinação e nanofibras (NTiO₂) obtidas por método hidrotérmico⁵.

Resultados e discussão

Os filmes foram sintetizados pelo método de *casting* em presença de reticulante glutaraldeído (GA), com variação de amostras de TiO₂ (calcinado e NTiO₂). Foram sintetizados 4 filmes, sendo os filmes 2.1 e 2.3 sintetizados a partir de TiO₂ calcinado e os filmes 4.1 e 4.3 com NTiO₂, obedecendo a ordem de proporção mássica de 1:1 e 1:2,7 (QUI:TiO₂). Os filmes apresentaram coloração branca e boa aderência à placa de vidro. As análises de MEV e EDS foram

realizadas em equipamento JSM-6610LV da marca Jeol, com microsonda de EDS, com voltagem de aceleração de 15 KeV e faixa de magnificação de 1000 a 500 vezes. Ouro (Au) foi utilizado para recobrimento das amostras, em corrente de 20 mA, por 120 s. Os filmes 4.1 e 4.3 evidenciaram, pela MEV, superfície mais heterogênea que os filmes 2.1 e 2.3, o que está de acordo com o esperado, já que a amostra de NTiO₂ garante maior área superficial. O filme 4.3 mostrou superfície mais heterogênea e com grumos maiores na superfície. Dados de EDS evidenciaram presença de C, O, N, bem como, porcentagem atômica de Ti entre 20-21%.

Conclusões

Formulações de TiO₂-quitosana modificada, com variação na proporção mássica QUI:TiO₂, bem como variação do tipo de amostra de TiO₂ (purificado por calcinação e NTiO₂) resultaram em filmes estáveis. Os filmes contendo NTiO₂, com maior proporção mássica, evidenciaram superfície mais heterogênea e presença de grumos pela MEV. A análise do EDS identificou os constituintes esperados em cada filme.

Agradecimentos

Ao grupo do Laboratório de Sólidos Inorgânicos (LASIR). NAMITEC (CNPq 406193/2022-3).

Referências e notas

- (1) Blank, H. et al. *Energias renováveis e valorização de resíduos: o caminho para a sustentabilidade*. Rio de Janeiro: Editora e-publicar, **2022**. 7, 82.
- (2) Etshindo, L. A. et al. *React. Kinet. Mech. Catal.* **2021**, 132(1), 547.
- (3) Irshad, M. A et al; *Ecotoxicol. Environ. Saf.* **2021**, 212, 111978.
- (4) Gonsalves, A. A et al. *Quím. Nova.* **2011**, 34(7), 1216.
- (5) Inoue, M.D. *Síntese de filmes de quitosana/TiO₂ dopados com ZnO e SiO₂*. **2022**. 74 f. TCC - Bacharelado em Química, Universidade Federal de Pelotas.

Equipamento para aquecimento e controle de temperatura em reações solvatotérmicas

Antonio A. A. Chepluki (PG)^{1*}, Eric T. Bastos (IC)¹, Fernando Ely (PQ)², Tiago E. A. Frizon (PQ)¹.
antonio.chepluki@gmail.com.

¹Departamento de Energia e Sustentabilidade, Universidade Federal de Santa Catarina, Araranguá-SC.

²CTI Renato Archer, Campinas-SP.

Palavras-Chave: Síntese, Hidrotérmica, Solvatotérmica, Controle, Temperatura, Reator.

Introdução

A síntese hidrotérmica/solvatotérmica é uma técnica simples e muito atraente para o processamento de materiais nanohíbridos e nanocompósitos (1). Na técnica, a reação é conduzida em reatores hidrotérmicos (autoclave) que operam em alta temperatura e pressão. É muito comum que o aquecimento desses reatores seja efetuado sobre chapas, fornos ou estufas devido à dificuldade de aquisição de um equipamento adequado. Porém, neste cenário, é difícil realizar o controle da temperatura e a taxa de aquecimento do reator, parâmetros essenciais para o sucesso das reações. Com base nisso, neste trabalho é apresentado o desenvolvimento de um sistema de monitoramento, aquecimento e controle de temperatura para um reator hidrotérmico, o qual foi utilizado para a síntese de pontos quânticos de carbono (PQCs).

Resultados e discussão

O equipamento (Fig. 1a) foi construído com base em componentes acessíveis e de baixo custo. O sistema é controlado e monitorado por um aplicativo, o qual foi desenvolvido na plataforma de *IoT Blynk*. A programação do microcontrolador foi executada através da extensão *PlatformIO* no software *VSCode*. A comunicação do aplicativo com o equipamento é realizada via *wifi*, onde o microcontrolador (ESP32) recebe os parâmetros da reação definidos no smartphone do usuário (temperatura [°C] e duração [h]) e aciona o módulo *dimmer* que realiza o controle da potência dissipada na abraçadeira térmica, a qual está envolta no reator. O sistema recebe o feedback de controle por um termopar que possibilita a obtenção da temperatura na parede da abraçadeira. O sistema de controle utilizado é o tipo PID. Para segurança, o equipamento possui um relé térmico que rompe e desativa o aquecimento no caso de falha no sistema de controle. Além da configuração e ativação do sistema, o aplicativo permite monitorar a temperatura e o tempo decorrido de reação, recebendo os dados de leitura de

temperatura em tempo real. A Fig. 1b apresenta a curva de aquecimento obtida durante uma reação de síntese conduzida a 180°C por 24h, replicando a metodologia proposta por Cai e colaboradores (2022) para a síntese de PQCs a partir do 1,3,6-trinitropireno.

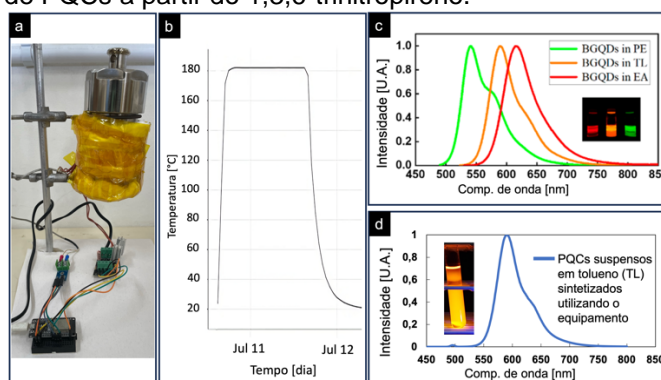


Figura 1. Protótipo do equipamento (a), gráfico da temperatura em função do tempo (b), emissão de fluorescência do PQC em diferentes solventes segundo Cai e colaboradores (2022) (c) e emissão de fluorescência do PQC sintetizado disperso em tolueno (d).

Conclusões

O sistema de controle desenvolvido para o equipamento apresenta bom desempenho e alta estabilidade térmica, pois a temperatura atingiu o valor desejado e se manteve estável durante a reação, conforme observado na Fig. 1b. Além disso, o material obtido na reação teste (Fig.1d), apresentou as mesmas características de emissão de fluorescência daquele sintetizado por Cai e colaboradores (Fig.1c) (2022), o que evidencia o bom desempenho do equipamento desenvolvido.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, CTI Renato Archer e UFSC.

Referências e notas

- (1) Feng, S. H.; Li, G. H.; In *Modern Inorganic Synthetic Chemistry*: Second Edition; Elsevier Inc., 2017; pp. 73–104.
- (2) Cai, K. Bin; Huang, H. Y.; Hsieh, M. L.; Chen, P. W.; Chiang, S. E.; Chang, S. H.; Shen, J. L.; Liu, W. R.; Yuan, C. T.; *ACS Nano* **2022**, *16*, 3994.

Caracterização de micropartículas de quitosana-vanilina para uso alternativo ao microplástico em formulações de higiene e limpeza

Isadora Atrib Garcia (PG)^{1*}, Aline Joana Rolina Wohlmuth Alves dos Santos (PQ)¹, Daniela Bianchini (PQ)¹.
*isadoraatrib@hotmail.com

¹Universidade Federal de Pelotas- UFPel, Campus Universitário Capão do Leão, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos- CCQFA, Laboratório de Sólidos Inorgânicos- LASIR.

Palavras Chave: biodegradável, esfoliante, abrasivo, EDS, MEV, FT-IV,

Introdução

Um dos aspectos mais determinantes da poluição causada por materiais poliméricos pertence às microformas plásticas. Alguns produtos de higiene e limpeza contêm em sua composição micro e nanopartículas plásticas, a exemplo de esfoliantes, tais como: cremes, sabonetes, cremes dentais e loções, que após o uso, são consideradas poluentes ambientais em águas residuais domésticas.¹ Como alternativa ao microplástico, micropartículas biodegradáveis de quitosana e quitosana modificada podem ser consideradas interessantes. Uma proposta de modificação da quitosana é decorrente da inserção de grupamentos imina oriundos da ligação do aldeído da vanilina com o grupo amino da quitosana², podendo gerar formulações de produtos abrasivos³ de higiene e limpeza, que agregam propriedades antimicrobianas da quitosana⁴ e propriedades antimicrobianas e antioxidantes da vanilina³. Desta forma, o objetivo deste trabalho é a caracterização de microesferas de quitosana-vanilina, que foram previamente sintetizadas, fazendo uso de microscopia eletrônica de varredura (MEV), espectroscopia de dispersão eletrônica de raios-X (EDS) e espectroscopia na região do infravermelho (FT-IR).

Resultados e discussão

As microesferas de quitosana (ME-1) e de quitosana-vanilina (ME-1V) foram previamente sintetizadas no Laboratório de Sólidos Inorgânicos (LASIR). Sua caracterização por meio de MEV evidenciou, para as esferas secas, superfície lisa para duas ME-1V, presença de alguns grumos e heterogeneidade em tamanho (822 x 717 μm e 801 x 741 μm). A análise de EDS evidenciou átomos de C, N e O, que são os principais constituintes da matéria orgânica das ME-1 e

ME-1V. A análise de FT-IV de ME-1 mostrou bandas características de quitosana⁴: banda larga de $\nu[\text{O}-\text{H}/\text{N}-\text{H}]$ em 3426 cm^{-1} , $\nu[\text{C}=\text{O}]$ da amida I em 1659 cm^{-1} , banda de $\delta[\text{N}-\text{H}]$ no plano em 1593 cm^{-1} da amida II, banda $\nu[\text{C}-\text{H}]$ em 2924 cm^{-1} e $\nu[\text{C}-\text{O}-\text{C}-]$ 1086 cm^{-1} da estrutura do polissacarídeo. O espectro da vanilina mostrou: $\nu[\text{OH}]$ em 3194 cm^{-1} , $\nu[\text{C}=\text{O}]$, em 1680 cm^{-1} , $\nu[\text{C}=\text{C}]$ em 1593 cm^{-1} , $\nu[\text{O}-\text{H}]$ em 1285 cm^{-1} e $\delta[\text{C}-\text{H}]$ em 849 cm^{-1} . Para ME-1V foi possível observar, além das bandas características de quitosana, a banda $\nu[\text{C}=\text{N}]$ em 1646 cm^{-1} referente ao grupo imina entre quitosana-vanilina³. Além disso, para ME-1V evidenciou-se: $\nu[\text{O}-\text{H}/\text{N}-\text{H}]$ em 3353 cm^{-1} , semelhante ao observado para ME-1, $\nu[\text{C}=\text{C}]$ da vanilina em 1522 cm^{-1} e $\nu[\text{C}-\text{O}]$ do grupo éter ligado ao anel aromático da vanilina em 1286 cm^{-1} .

Conclusões

As micrografias evidenciaram microesferas de quitosana-vanilina, com forma e tamanho definidos, sendo que sua constituição atômica foi comprovada por EDS. A análise de FT-IV comprovou a presença dos grupos esperados nas estruturas das microesferas, com destaque à interação quitosana-vanilina por meio do grupo imina. As esferas com vanilina mostraram-se adequadas como alternativa ao microplástico.

Agradecimentos

LASIR - UFPel. CAPES (bolsa de mestrado). CAPES - PROAP [001]. NAMITEC (CNPq/406193/2022-3).

Referências e notas

- (1) Vargas, J. G.M. et al. *Quim. Nova.* **2022**, 45, 705.
- (2) Pal, P. et al. *Chemosp.* **2021**, 266, 128984.
- (3) Peng, H. et al. *Food Chem.*, **2010**, 121, 23-28.
- (4) Giacomini, G. X. et al. *Acta Sci. Biol. Sci.*, **2023**, 25, 1-11.

Síntese e caracterização de nanofomas de TiO₂ para produção de material fotocatalítico

Aline Joana Rolina Wohlmuth Alves dos Santos¹ (PQ)*, Thaís Pires dos Santos² (IC), Mariana Inoue Dupinski³ (IC), Stella Quadros Fernandes⁴ (IC), Isadora Atrib Garcia⁵ (PG), Henrique Blank⁶ (IC), Wladimir Hernandez Flores⁷ (PQ).
alinejoana@gmail.com

¹Universidade Federal de Pelotas (UFPel), Centro de Ciências Químicas Farmacêuticas e de Alimentos (CCQFA)

^{2,3,4}UFPel – Curso de Química Bacharelado

⁵UFPel – Programa de Pós-Graduação em Química (PPGQ)

⁶UFPel – Curso de Farmácia Bacharelado

⁷Universidade Federal do Pampa (UNIPAMPA – Campus Bagé)

Palavras Nanotecnologia, Fotocatalisadores, DR-X, FT-IV, TGA, MEV/EDS.

Introdução

Compostos inorgânicos, como o dióxido de titânio (TiO₂) na forma nano (10⁻⁹m), contam com aumento significativo de área superficial¹. A forma de nanofibras ainda evidencia o incremento no direcionamento do material, que pode resultar em eficiência nas aplicações. Para tratamento fotocatalítico de águas residuais, este óxido pode ser suportado em polímeros orgânicos, tais como a quitosana, facilitando seu uso e reuso^{1,2}. Quando sua cristalinidade apresenta-se como anatase, é descrita melhora na atividade fotocatalítica³ e aplicação na degradação e mineralização de moléculas orgânicas pode ser evidenciada⁴. Desta forma, o objetivo deste trabalho foi sintetizar e caracterizar nanofomas de TiO₂, partindo de amostra calcinada, para imobilização em material polimérico e aplicação como fotocatalisador de poluentes orgânicos emergentes em águas residuais.

Resultados e discussão

Amostra obtida comercialmente (TiO₂) foi purificada por calcinação (CTiO₂)⁵ e nanofomas (NTiO₂) foram obtidas via processo hidrotermal^{5,6} com uso de sistema de refluxo e aquecimento convencional, com rendimento de 99,8% e 87,7%, respectivamente. As amostras obtidas foram caracterizadas por: FT-IV, TGA, DRX, MEV e EDS. A banda ν[Ti-O] é evidenciada em: 790 cm⁻¹ (TiO₂), 862 cm⁻¹ (CTiO₂) e 729 cm⁻¹ (NTiO₂). No intervalo de 30 à 700 °C, as 3 amostras evidenciaram estabilidade, com o diferencial que NTiO₂ mostrou maior perda de massa de 30 à 200 °C, indicando maior hidratação. Os difratogramas evidenciaram a cristalinidade do tipo anatase, com picos em 2θ de: 25,3° (101), 37,85° (004), 48,05° (200), 53,9° (105), 55,1° (211) e 62,65° (204),

para as 3 amostras. TiO₂ e CTiO₂ apresentaram aglomerado de partículas em algumas regiões das micrografias, já NTiO₂ mostrou mudança na superfície, em relação ao seu precursor CTiO₂, com a formação de filamentos observados nas magnitudes de 10.000-50.0000 vezes, como resultado do processo de síntese hidrotermal em um período de 5 h, à 130 °C. A análise de EDS indicou a presença de Ti com % atômica: 20,98% (TiO₂), 23,33% (CTiO₂) e 28,93% (NTiO₂).

Conclusões

Nanofomas do tipo fibras de TiO₂ anatase foram sintetizadas e caracterizadas. Há interesse em sua imobilização em quitosana para avaliação como fotocatalisador, como adsorvente de corantes, bem como a utilização da metodologia hidrotermal de síntese de nanofomas para outros óxidos.

Agradecimentos

Laboratório de Sólidos Inorgânicos (LASIR-UFPel). CAPES [001]. CNPq/NAMITEC (406193/2022-3).

Referencias e notas

- (1) Etshindo, L.A. et al. *React. Kinet. Mech. Catal.* **2021**, 132(1), 547.
- (2) Irshad, M.A et al; *Ecotoxicol. Environ. Saf.* **2021**, 212, 111978.
- (3) Jafri, M.N.N. et al. *Memb.* **2022**, 11, 2.
- (4) Albornoz, L.L. et al. *J. Chem. Eng.*, **2021**, 414, 128891.
- (5) Inoue, M.D. *Síntese de filmes de quitosana/TiO₂ dopados com ZnO e SiO₂*. **2022**. 74 f. TCC – Bach. em Química, UFPel.
- (6) Vu, T.H.T. et al. *Journ. Mat. Scien.* **2014**, 46, 19.

Síntese e caracterização de pontos quânticos de carbono a partir do 1,3,6-trinitropireno dopados com cobre e boro

Eric T. Bastos (IC)^{1*}, Antonio A. A. Chepluki (PG)^{1*}, Fernando Ely (PQ)², Tiago E. A. Frizon (PQ)^{1*}.
erictbastos@gmail.com; antonio.chepluki@gmail.com; tiago.frizon@ufsc.br

¹Departamento de Energia e Sustentabilidade, Universidade Federal de Santa Catarina, Araranguá-SC.

²CTI Renato Archer, Campinas-SP.

Palavras-Chave: Ponto Quântico, 1,3,6-trinitropireno, Síntese, Dopado, Cobre, Ácido Bórico.

Introdução

Pontos Quânticos (PQs) são cristais semicondutores coloidais com dimensões nanométricas que foram produzidos pela primeira vez no início da década de 1980. A partir disso, muitos estudos sobre PQs foram desenvolvidos em diferentes campos (1), além disso, os PQs têm um custo de síntese e propriedades ópticas e químicas equivalentes ou superiores comparados com pontos quânticos semicondutores inorgânicos tradicionais (2). Neste estudo, relatamos a síntese de PQs usando o 1,3,6-trinitropireno como material precursor, ácido bórico e íons metálicos como agentes funcionalizantes com o objetivo de avaliar a influência dos dopantes nas propriedades fotoluminescentes do nanomaterial obtido.

Resultados e discussão

A síntese foi realizada utilizando a metodologia proposta por Cai e colaboradores (2022), conforme figura 1:

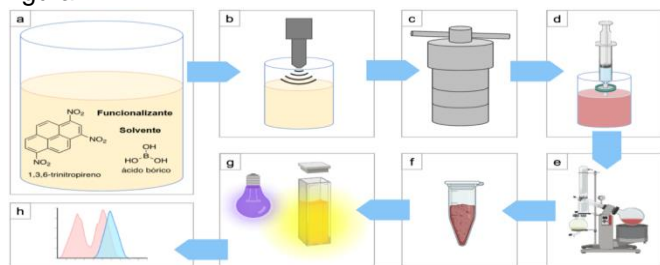


Figura 1. Síntese do 1,3,6-trinitropireno com ácido bórico

As análises de fluorescência e rendimento quântico evidenciaram que a adição de ácido bórico aumenta o rendimento quântico de fotoluminescência dos PQs. Enquanto a adição de íons de cobre (II) desloca o comprimento de onda de emissão máxima de 600 nm (vermelho) para 450 nm (azul), porém, reduz o rendimento quântico de ~61% (apenas com o ácido bórico) para ~40% com a adição do cobre. Além disso,

todos os PQs preparados são altamente solúveis em solventes comuns e apresentam forte solvatocromismo. A aplicação de tais PQs em concentradores solares luminescentes é demonstrada pela deposição em células solares c-Si como filme ou composto com EVA.

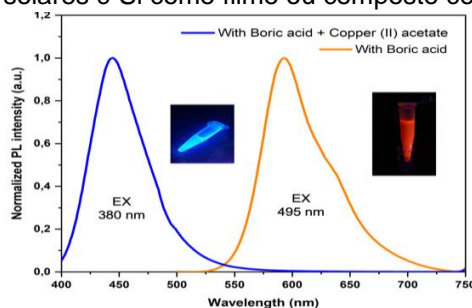


Figura 2. Emissão de fluorescência dos PQs sintetizados com e sem a adição de acetato de cobre II

Conclusões

Em conclusão, sintetizamos com sucesso pontos quânticos de carbono dopados com cobre (Cu-PQs) a partir de 1,3,6-trinitropireno (TNP) utilizando a técnica de condensação solvotérmica. O acetato de cobre (II) foi adicionado como um material funcionalizante, levando a uma possível alteração na configuração estrutural das nanopartículas. Em geral, este estudo destaca o potencial do TNP como precursor para a síntese de Cu-PQs e a importância da funcionalização de materiais na adaptação das propriedades ópticas e estruturais dos PQs.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, CTI Renato Archer e UFSC.

Referências e notas

- (1) R. Wang, K.Q. Lu, Z.-R. Tang, and Y.-J. Xu, *J Mater Chem A*, **5**, 3717-3734, **2017**
- (2) M. J. Molaei. *Solar Energy*, **196**, 549-566, **2020**
- (3) K. Bin Cai et al. *ACS Nano*, **16** (3), 3994-40, **2022**

Avaliação da estabilidade térmica de filmes de quitosana modificada-nanofibras de TiO₂

Thaís Pires Dos Santos¹ (IC)*, Stella Quadros Fernandes² (IC), Isadora Atrib Garcia³ (PG), Aline Joana Rolina Wohlmuth Alves Dos Santos⁴ (PQ). thaissantos01844@gmail.com

^{1,2}Universidade Federal de Pelotas (UFPEL), curso de Bacharelado em Química

³UFPEL, Programa de Pós-Graduação em Química (PPGQ)

⁴UFPEL, Centro de Ciências Químicas Farmacêuticas e de Alimentos (CCQFA)

Palavras Chave: Análise térmica, TGA, TiO₂, nanofibras.

Introdução

A quitosana (QUI) é um biopolímero sintetizado a partir da quitina¹ e que pode suportar compostos inorgânicos, como o dióxido de titânio (TiO₂)^{2,3}. Este óxido pode apresentar cristalinidade do tipo anatase, que contribui para evidência de atividade fotocatalítica, sendo que na forma de nanofibras, essa atividade pode ser exacerbada em função do aumento da área superficial e direcionamento do material³. Além disso, o pó de TiO₂ suportado em filmes de quitosana facilita sua utilização e reutilização⁴. Já a adição de reticulantes à quitosana, como o glutaraldeído, pode favorecer a formação de filmes, trazendo propriedades de estabilidade desejada ao material⁵. Desta forma, o objetivo deste trabalho foi avaliar a estabilidade térmica, por meio de análise termogravimétrica (TGA) em uma faixa de temperatura de 30-500°C, para filmes de quitosana modificada-nanofibras de TiO₂.

Resultados e discussão

A quitosana¹ e as amostras de TiO₂² purificada por calcinação (CTiO₂) e na forma de nanofibras (NTiO₂) sintetizada via processo hidrotermal⁶ foram previamente obtidas pelo grupo. Os filmes foram sintetizados pelo método de *casting*, em presença de reticulante glutaraldeído (GA). Foram sintetizados 4 filmes, sendo os filmes 2.1 e 2.3 sintetizados a partir de CTiO₂ e os filmes 4.1 e 4.3 com NTiO₂, obedecendo a ordem de proporção mássica de 1:1 e 1:2,7 (QUI:TiO₂). Os filmes apresentam coloração branca e mostraram-se aderidos à placa de vidro. A análise de TGA foi realizada em equipamento DTG-60, Shimadzu, de 30-500°C, com fluxo de N₂ (50 mL/min) e taxa de aquecimento de 10°C/min. Perfis térmicos semelhantes foram observados para as amostras, independente da variação na proporção de TiO₂. Os dados foram tratados no programa Origin 8.5. Os filmes com NTiO₂ (4.1 e 4.3)

apresentaram maior perda de massa no primeiro estágio térmico (30-250°C) 11,140% e 5,328%, respectivamente, indicando maior hidratação das amostras contendo NTiO₂ que os filmes 2.1 (6,179%) e 2.3 (2,526%) contendo CTiO₂. O segundo estágio térmico (250-500°C) refere-se à decomposição da parte orgânica dos filmes, constituída por QUI e GA: 2.1 (20,597%), 2.3 (12,404%), 4.1 (24,935%), 4.3 (14,721%). A maior proporção de TiO₂ em 2.3 e 4.3 resultou em presença de mais resíduo ao final da análise (500° C), bem como menor perda de massa na faixa 250-500°C.

Conclusões

As amostras evidenciaram perfil térmico semelhante, independente da proporção mássica entre quitosana modificada:TiO₂. A presença de NTiO₂ garantiu mais hidratação aos filmes de quitosana modificada que a presença de CTiO₂.

Agradecimentos

Ao grupo do Laboratório de Sólidos Inorgânicos (LASIR). À UFPEL – PBIP-AF pela bolsa de iniciação científica. NAMITEC (CNPq -406193/2022-3).

Referencias e notas

- (1) BLANK, H. et al. *Energias renováveis e valorização de resíduos: o caminho para a sustentabilidade*. RJ: Ed e-publicar, **2022**. 7, 82.
- (2) INOUE, M.D. *Síntese de filmes de quitosana/TiO₂ dopados com ZnO e SiO₂*. **2022**. 74 f. TCC – Bacharelado em Química, UFPEL.
- (3) JAFRI, M.N.N. et al. *Memb.* **2022**, 11, 2.
- (4) ETSHINDO, L.A. et al. *React. Kinet. Mech. Catal.* **2021**,13(1), 547.
- (5) PAVONI, J.M.F et al.. *Polym. Bull.* **2020**, 10, 981.
- (6) VU, T. H. T. et al. *Journ. Mat. Scien.* **2014**, 46, 19.

Síntese, funcionalização e caracterização de pontos quânticos de carbono com nitrogênio e enxofre para aplicação em nanocompósito polimérico

Inara Facin Stefanello (PG)^{1*}, Lara Fernandes dos Santos Lavelli (PQ)¹, Eduardo Zapp (PQ)¹.

*inara-facin@hotmail.com

¹Universidade Federal de Santa Catarina, campus Blumenau (UFSC-BNU)

Palavras Chave: Nanomaterial, CQDs; Propriedades ópticas, Propriedades eletroquímicas.

Introdução

Pontos quânticos de carbono (CQDs), são compostos por um núcleo carbogênico nanocristalino amorfo, formado majoritariamente por carbono sp^2 , e por grupos de superfície, fornecendo habilidades versáteis para maior funcionalização e passivação da superfície. Dependendo da rota sintética e precursores utilizados para funcionalização da nanoestrutura¹, diferentes aplicações são possíveis, dentre elas a aplicação na obtenção de nanocompósitos poliméricos. A combinação de nanomateriais com um polímero fornece um material flexível, resistente e com maior durabilidade, podendo ser utilizado em diversos dispositivos (foto)eletroquímicos².

Resultados e discussão

Os CQDs sem dopagem e co-dopados com N e S (S,N-CQDs) foram obtidos por síntese térmica. Também foi obtida uma amostra com redução dos grupos de superfície (r-S,N-CQDs). As amostras foram caracterizadas por diferentes técnicas, mostrando que a co-dopagem com N e S, ampliou o espectro de absorbância dos CQDs, devido a inserção de novas armadilhas eletrônicas, já no espectro de fotoluminescência foi visualizada a diminuição na largura do espectro, enquanto nos voltamogramas (voltametria cíclica - CV), foi possível verificar novos picos relacionados aos processos de oxidação e redução, também atribuídos a inserção dos grupos de superfície. As medidas de espectroscopia de impedância eletroquímica com diferentes potenciais (ER-EIS), mostraram uma diminuição nos valores de *bandgap*, favorecendo um aumento na condutividade. Foram empregadas três técnicas para obtenção dos valores de *bandgap*, sendo elas UV-vis, CV e ER-EIS. As amostras, S,N-CQDs e r-S,N-CQDs apresentaram diferentes valores de *bandgap*, proporcionando ao nanomaterial uma multifuncionalidade para sua aplicação em sistemas fotovoltaicos, como por exemplo compatibilidade energética com semicondutores inorgânicos, baixo *bandgap* (corante), e como eletrólito.

Diante disso, as amostra S,N-CQDs (oxidada e reduzida) foram selecionadas para aplicação em um nanocompósito polimérico, que foi obtido combinando

os CQDs sintetizados e a matriz polimérica a base de etil(hidroxi)etil celulose (EHEC). A amostra EHEC_S,N-CQDs na forma oxidada, apresentou maior condutividade, atribuído a alta concentração de nanopartículas na amostra, bem como na maior heterogeneidade dos tamanhos de nanopartículas no material, e dos diferentes portadores de cargas presentes no nanomaterial (semicondutor do tipo n e p). Além disso, foi a amostra mais eficiente na geração de fotocorrente, esse comportamento está associado a heterogeneidade de estruturas no nanomaterial, bem como, a sua condutividade que alcançou $10,40 \mu S cm^{-1}$, e aos tipos de semicondutores presentes na nanoestrutura. Dessa forma, foi possível verificar a influência dos CQDs co-dopados com N e S na geração de fotocorrente quando dispersos na matriz de EHEC, gerando um PCE (eficiência de conversão) de 0,185%.

Conclusões

Por conseguinte, entende-se que o nanocompósito polimérico obtido apresenta respostas de fotocorrente, podendo ser utilizado em sistemas fotovoltaicos, apesar do seu baixo PCE, que pode ser atribuído também a lâmpada utilizada, ainda assim o presente trabalho se mostra promissor, pois a utilização do nanocompósito polimérico pode substituir o uso de corantes e eletrólitos líquidos em células fotovoltaicas.

Agradecimentos

FAPESC, LCME, UFSC-BNU, CReAte, LAEES, LabNano.

Referências e notas

- (1) Wang, Y.; Hu, A. *J. Mater. Chem. C* **2014**, *2*(34), 6921.
- (2) Zulfajri, M.; Sudewi, S.; Ismulyati, S.; Rasool, A.; Adlim, M.; Huang, G. M. *Coatings* **2021**, *11*, 1100.

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE FERRITAS DE NÍQUEL PARA APLICAÇÕES CATALÍTICAS

Pâmela Macchion^{1*} (IC), Henrique P. Mota¹ (PG), Jaqueline F. de Souza² (PG), André R. Fajardo¹ (PQ).
(*) pamelamacchion10@gmail.com.

1- Laboratório de Tecnologia e Desenvolvimento de Compósitos e Materiais Poliméricos (LaCoPol), Universidade Federal de Pelotas (UFPel), Campus Capão do Leão, Pelotas-RS, Brasil.

2- Laboratório de Bioinorgânica e Materiais Porfirínicos (LBMP), Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), Santa Maria-RS, Brasil.

Palavras-Chave: Catálise heterogênea, Óxidos de ferro, Níquel, Reações orgânicas.

Introdução

A utilização de óxidos metálicos com propriedades magnéticas como catalisadores heterogêneos é promissora devido à sua fácil separação do meio reacional. Dentre os óxidos existentes, as ferritas de níquel destacam-se em virtude de sua propriedade ferromagnética, resultante da estrutura cristalina espinélio inversa¹. Embora metais de transição sejam conhecidos por ativar ligações C-C ou C-H em reações orgânicas, seu uso em solução pode ser custoso em termos de purificação e pode levar à formação de subprodutos indesejados². Portanto, a síntese de NiFe₂O₄ via método sol-gel foi explorada como uma abordagem alternativa, economicamente viável, visando aplicá-lo como um catalisador heterogêneo eficaz.

Resultados e discussão

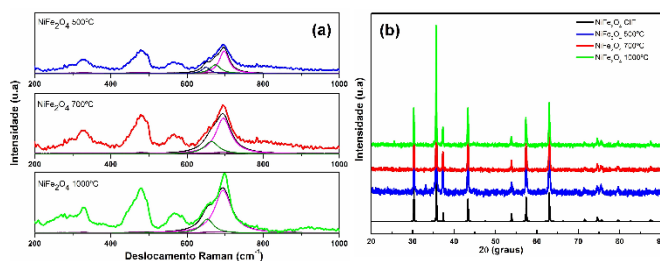


Figura 1. (a) Espectro Raman e (b) padrões de DRX para óxidos NiFe₂O₄ sintetizados em diferentes temperaturas.

Na Fig. 1(a) tem-se a análise de Raman, onde foram identificados picos em torno de 480 cm⁻¹, atribuídos ao Ni²⁺ em sítios octaédricos, e picos em torno de 684 cm⁻¹, associados ao Fe³⁺ em sítios tetraédricos. Na Fig. 1(b) temos a análise de DRX, onde observa-se um pico principal em aproximadamente 35,6°, correspondendo ao padrão de difração da amostra. Assim como nos espectros de Raman, os padrões de DRX dos óxidos

exibiram maior intensidade à medida que a temperatura de calcinação aumentou. Indicando assim, uma maior cristalinidade.

Tabela 1. Massa após síntese e rendimento dos óxidos de NiFe₂O₄ puros sintetizados em diferentes temperaturas.

Amostra	Massa total (mg)	Rendimento de NiFe ₂ O ₄ puro (%)
500 °C	870,9	62
700 °C	741,4	76
1000 °C	532,5	98

Na Tabela 1 pode-se observar comportamento semelhante. Esse resultado foi obtido pela remoção dos elementos contaminantes da amostra, que por sua vez podem comprometer o desempenho do catalisador.

Conclusão

Em suma, observou-se que utilizando-se 1000 °C, o material apresentou maior rendimento, interações moleculares mais intensas, estáveis e aumento da cristalinidade. Tais fatores contribuem para uma maior estabilidade e ferromagnetismo do material.

Agradecimentos



Referências e notas

- (1) Nihore. A.; Aziz. F.; et al. *Mater. Today: Proc.* **2019**, 18, 3651-3656.
- (2) Chakraborty. N.; Das. B.; et al. *Eur. J. Org. Chem.* **2022**, 2022, 86-116.

Efeito dos parâmetros operacionais, massa e vazão de Nitrogênio, na produção de biogás através da pirólise da casca de arroz

Lucas Aldrighi Silveira (PQ), Pauline Klasen Oliveira (PQ), Diego Gil de los Santos (PQ), Michele Espinosa da Cunha (PQ), Mirian Dosolina Fusinato (PQ), Pedro José Sanches Filho (PQ)*

Grupo de Pesquisa em Contaminantes Ambientais –GPCA-IFSUL- Campus Pelotas; * pedrofilho@ifsul.edu.br

Palavras Chave: Biomassa, Energias renováveis, Termoconversão.

Introdução

A casca de arroz (CA) é uma fonte de biomassa lignocelulósica amplamente gerada na região sul do Brasil, e seu manuseio incorreto pode levar a problemas ambientais. Essa casca pode ser utilizada para a produção de bio-óleo, biocarvão e biogás através do processo de pirólise, que é o craqueamento da biomassa por aquecimento em ausência de oxigênio (1,2). Os rendimentos dos produtos dependem fortemente dos parâmetros operacionais adotados (1). Este trabalho tem por objetivo estudar os rendimentos em biogás avaliando os parâmetros operacionais massa alimentada e fluxo de nitrogênio. Para o estudo foi aplicado um planejamento fatorial 2^2 com 3 repetições do ponto central, utilizando massas de 50, 100 e 150g e vazões de Nitrogênio de 20, 60 e 100 mL min⁻¹. O processo de pirólise foi realizado em planta piloto com reator de leito fixo, a 600°C por 10 minutos.

Resultados e discussão

A partir da TGA e das limitações operacionais do reator, foi definida a temperatura para pirólise de 600°C. O teste de Pareto apresentou todos os efeitos como significativos, sendo a interação entre a massa e temperatura o principal efeito no rendimento do biogás. A tabela 1 apresenta os rendimentos em biogás, verificando-se que nos menores níveis (teste 1) resultou no maior rendimento em biogás. Nestas condições o tempo de residência no reator dos compostos voláteis gerados nas reações primárias de despolimerização é maior, favorecendo às reações adicionais de craqueamento, em virtude da alta temperatura na zona superior do reator. Para os experimentos 3 e 4, que foram realizados utilizando a maior quantidade (150g), o efeito contrário foi observado, a diminuição da vazão reduziu o rendimento de biogás, condições que favorecem a formação de biocarvão (1)

Tabela 1: Tabela Matriz do planejamento com as variáveis independentes e a resposta em % de biogás

Teste	m(g)	N ₂	X ₁	X ₂	% Gás
1	50	20	-1	-1	43,7
2	50	100	-1	1	31,4
3	150	20	1	-1	16,7
4	150	100	1	1	36,3
5	100	60	0	0	36,2
6	100	60	0	0	35,6
7	100	60	0	0	36,1

*Gás + perdas do processo; m: massa de casca de arroz; N₂ Fluxo mL min⁻¹

A situação é confirmada quando comparamos os experimentos 1 (50g de CA) e 3 (150g de CA), com maior massa e onde a área livre do reator se torna menor.

Conclusões

A influência da quantidade de biomassa no reator e da vazão do gás de arraste na produção de biogás foi determinada. Os menores níveis (massa de CA e fluxo de N₂) resultaram em rendimentos superiores a 40%. O modelo estatístico apresentou o coeficiente de determinação de 0,994, porém, a falta de ajuste foi significativa. O estudo apresenta a pirólise da casca de arroz como alternativa para produção de biogás a partir da casca de arroz.

Agradecimentos

À PROPESP –IFSUL pela estrutura e financiamento.

Referencias e notas

- (1) ZHANG, J.; ZHANG, X. The thermochemical conversion of biomass into biofuels. In: Biomass, Biopolymer-Based Materials, and Bioenergy. [s.l.] Elsevier Ltd, 2019. p. 327–368. da Silva, J. F. M.; Garden, S. J.; Pinto, A. C. J. *Braz. Chem. Soc.* 2001, 12, 273. da Silva, J. F. M.; Garden, S. J.; Pinto, A. C. J. *Braz. Chem. Soc.* 2001, 22, 273.
- (2) BETEMPS, G. R. et al. Chromatographic characterization of bio-oil generated from rapid pyrolysis of rice husk in stainless steel reactor. *Microchemical Journal*, v. 134, p. 218–223, 2017. Dupont, J. *J. Braz. Chem. Soc.* 2004, 15, 341.

Como o Polimorfismo Estrutural e os Cátions Controlam o Efeito Bulk Rashba nas Perovskitas de Haleto

Luis O. de Araujo^{1*} (PG), Danilo N. Silveira¹ (PG), Celso R. C. Rêgo² (PQ), Wolfgang Wenzel² (PQ), Yohanes Pramudya² (PQ), Maurício J. Piotrowski³ (PQ), Fernando P. Sabino⁴ (PQ), Diego Guedes-Sobrinho¹ (PQ). E-mail: araujo.phys.chem@gmail.com

¹Universidade Federal do Paraná, Departamento de Química, Curitiba/PR, Brasil; ²Instituto de Tecnologia Karlsruhe, Instituto de Nanotecnologia Hermann-von-Helmholtz-Platz, Karlsruhe, Alemanha; ³Universidade Federal de Pelotas, Departamento de Física, Pelotas/RS, Brasil; ⁴Universidade Federal do ABC, Centro de Ciências Humanas e Naturais, Santo André/SP, Brasil

Palavras Chave: Efeito Bulk Rashba, Polimorfismo Estrutural, Perovskitas de Haleto.

Introdução

Perovskitas de haleto (MHPs) apresentando estruturas polimórficas têm sido descritas, em oposição à estrutura altamente simétrica $Pm-3m$ caracterizada por difração de raios-x.¹⁻³ Por conterem motivos estruturais de menor simetria (descentralizações dos cátions B (DC), distorções de Jahn-Teller (JT) e desordem posicional dos cátions A nas cavidades cuboetaédricas (PD)), fenômenos associados à ausência de inversão espacial como o efeito bulk Rashba (EBR) – a quebra de degenerescência de spin nas bandas de valência e condução das MHPs no espaço- k – têm se manifestado mesmo em sua fase cúbica, podendo prolongar o tempo de vida de portadores de carga foto gerados, melhorando o desempenho das MHPs em células solares. Contudo, os mecanismos que governam o EBR ao nível atômico não são bem compreendidos, limitando o desenvolvimento de estratégias experimentais eficazes para seu controle. Assim, por meio de um protocolo *ab initio* que considera efeitos de quasipartícula através do método DFT-1/2 e o acoplamento spin-órbita (SOC), nesse trabalho correlações entre composição química e polimorfismo nas MHPs ABl_3 (A=MA ou CH_3NH_3 , Cs; B= Si, Ge, Sn, Pb) são traçadas, revelando os mecanismos que levam ao aparecimento/supressão do EBR nesses materiais.

Resultados e discussão

Os principais resultados obtidos são apresentados na Figura 1. No painel (a) a intensidade do EBR, medida pela magnitude do coeficiente α nas bandas de valência (V) e condução (C), correlaciona-se diretamente com a intensidade do SOC do cátion B, com α_C diminuindo na sequência Pb→Si. Ademais, o aparecimento do EBR é estritamente associado à descentralização de B nos octaedros Bl_6 , dado que na estrutura $Pm-3m$ (platônica) ele foi completamente suprimido ($\alpha_{V,C}=0$). Logo, a descentralização de B é uma condição *sine qua non* para o aparecimento do EBR. Os resultados do painel (b) evidenciam a importância da presença de momento de dipolo (DM) no cátion A para o surgimento do EBR, uma vez que nas MHPs baseadas em Cs o efeito foi completamente suprimido. Assim sendo, a orientação dos DMs dos MAs é um dos fatores que controlam a magnitude do EBR nas MHPs híbridas, dado que sua adição vetorial com resul-

tante não nula culmina na descentralização dos cátions B de forma a reforçar o EBR, ao passo que seu cancelamento parcial ou total centraliza o cátion B e, assim, suprime o EBR.

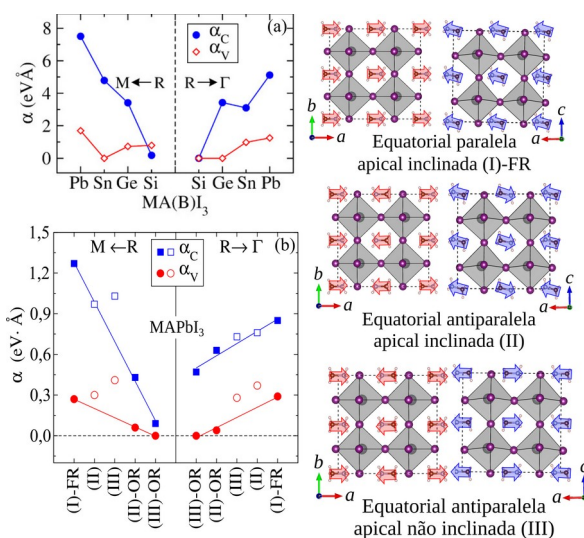


Figura 1. Coeficiente de Rashba (α) calculado para as bandas de valência (V) e condução (C) das MHPs ABl_3 . (a) Efeito do cátion B e (b) efeito do cátion A sobre o aparecimento/supressão do EBR.

Conclusões

Contribuições locais provenientes da orientação dos momentos de dipolo dos cátions MA nas cavidades cuboetaédricas, induzindo a descentralização/centralização dos cátions B nos octaedros Bl_6 – uma condição *sine qua non* para o aparecimento do EBR – são fatores-chave que controlam a magnitude do EBR nas MHPs, cujo mecanismo revelado pode direcionar o projeto de materiais otimizados para a aplicação em células solares de elevado desempenho.

Agradecimentos

UFPR, CAPES, LCPAD, KIT, SENAI-CIMATEC

Referencias e notas

- (1) de Araujo *et al.* *J. Phys. Chem. Lett.* **2021**, 12, 7245.
- (2) de Araujo *et al.* *J. Phys. Chem. C* **2022**, 126, 4, 2131.
- (3) de Araujo *et al.* *J. Comput. Chem.* **2023**, 44 (14), 139.

Synthesis and characterization of rice husk ash and graphene-based nanocomposites for removing contaminants from water

Mayara Bitencourt Leão¹ (PQ)*, Leonardo Costa Dias¹ (IC), Chiara Valsecchi² (PQ), Jaqueline Pinto Vargas¹ (PQ), Carolina Ferreira de Matos¹ (PQ). *mayaraleao@unipampa.edu.br*

¹Centro de Ciência e Tecnologia Ambiental, Universidade Federal do Pampa, Campus Caçapava do Sul, Caçapava do Sul, RS, Brasil, CEP 96570-000.

²Universidade Federal do Pampa, campus Alegrete, Alegrete, RS, Brasil, CEP 97546-550.

Keywords: Composite Nanomaterial Sorption, Safranin, Environmentally Friendly

Introduction

One of the problems related to water is the presence of contaminants since conventional water treatment technologies are ineffective in removing them. For this reason, it is necessary to develop new methods to remove these compounds, with the adsorption technique being one possibility. Among the sorbent materials used in water treatment are reduced graphene oxide (rGO) and its derivatives, and one of the ways to enhance its sorbent character is through its functionalization. A material that can be used for this purpose is rice husk ash (RHA), an agro-industrial residue from the combustion process. In this context, this work aimed to synthesize and characterize nanocomposites combining RHA and rGO, and apply it in the sorption of the safranin dye from the water.

Results and discussion

Graphene oxide (GO) and reduced graphene oxide (rGO) were obtained by methods already described in the literature¹. The RHA was provided by the URBANO Arroz industry, LTDA, São Gabriel-RS. The RHA-rGO nanocomposite was synthesized using the appropriate proportion of graphene oxide and RHA, which were maintained at reflux with the reducing agent NaBH₄. The solid material obtained was filtered, washed with distilled water and dried in an oven. All materials were characterized by Scanning Electron Microscopy (SEM) and Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR). The efficiency of the material in the sorption of the safranin dye was evaluated through a kinetic and isothermal study.

The morphology of materials was studied using SEM. In CCA, it can be observed that its particles have an elongated and contorted shape caused by the burning process; a shiny appearance refers to the presence of amorphous silica with high purity in the material. For rGO, the presence of sheets formed from the chemical oxidation of graphite and subsequent exfoliation is observed. In RHA-rGO, a microstructure can be seen that unites the characteristics of RHA and rGO, making

it possible to visualize a leafy structure with homogeneously distributed points that present the shiny aspect of RHA.

FTIR showed characteristic spectra of graphene oxide and RHA. The RHA-rGO FTIR spectrum showed characteristics of a composite, having bands of both constituent materials, and there was a decrease in the intensity of the spectra of the two initial materials, indicating a chemical interaction in the formation of the nanocomposite.

The kinetic study showed that the rGO and RHA-rGO presented an equilibrium time of about 25 h; the RHA, on the other hand, demonstrated an adsorption equilibrium time of 8 h. In the adsorption isotherms, according to the Langmuir isothermal model, the value of Q_{max} was 148.89 mg/g for RHA-rGO, 49.34 mg/g for RHA and 37.03 mg/g for rGO. So, although the adsorptive process is slower for RHA-rGO, the same material has higher adsorptive capacities. It is observed that the composite material presents a synergistic behavior resulting from the union of the CCA and rGO materials.

Conclusions

This work resulted in a physically well-structured nanocomposite with functional groups that contribute to a good sorption capacity of the safranin dye. In addition, the nanocomposite has other advantages such as ease of obtaining, low cost and an environmentally friendly synthesis.

Acknowledgments

The authors thank CNPq, FAPERGS and INCT of Carbon Nanomaterials for funding.

References

- (1) Leão, M. B.; Rosa, P. C. C.; Dalla Corte, C. L.; Matos, C. F. *Mater. Chem. Phys.* **2022**, 288, 126408.

Micropartículas de poli(ácido acrílico) recobertas com polietilenoimina contendo íons de Cu^{2+} : Um potencial catalisador para a síntese de 3-arilselanilindol

Jaqueline F. Souza^{1*} (PQ), Thalita F.B. de Aquino² (PQ), Ismael C. Bellettini³ (PQ), Daniela Hartwig² (PQ), Raquel G. Jacob² (PQ), André R. Fajardo¹ (PQ), Bernardo A. Iglesias⁴ (PQ). jferreirasouza93@hotmail.com

^{1,2} Universidade Federal de Pelotas (UFPel), Campus Capão do Leão, 96010-900, Pelotas, RS, Brasil. ³Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), Campus Blumenau, 89065-004, Blumenau, SC, Brasil. ⁴ Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), Campus Sede, 97105-900, Santa Maria, RS, Brasil.

Palavras Chave:(Catálise, catálise heterogênea, polímeros, metais, síntese orgânica).

Introdução

Vários compostos têm sido utilizados no desenvolvimento de sistemas catalíticos heterogêneos baseados no suporte de espécies metálicas. Devido às suas diversas funcionalidades, os materiais poliméricos são uma classe promissora de compostos capazes de suportar e estabilizar metais. A polietilenoimina (PEI) é um polímero sintético, que pode ser encontrado nas formas ramificada e linear. A PEI linear (LPEI) possui aminas primárias (R-NH₂) e secundárias (R₁-NH-R₂) em sua estrutura. Sabe-se que estes grupos são altamente reativos e capazes de fornecer sítios de coordenação com íons metálicos, formando assim complexos estáveis. Este trabalho descreve a síntese de micropartículas de poli(ácido acrílico) (PAAc) decoradas com LPEI contendo íons Cu^{2+} . PAAc é um polímero sintético o qual contém diversos grupos carboxila (-COOH) em sua estrutura conferindo-lhe um caráter aniônico, o que permite a complexação com íons metálicos. A mistura destes dois polímeros permite obter um material robusto e estável que pode ser aplicado na síntese de 3-arilselanilindols

Resultados e Discussão

Foram desenvolvidas micropartículas de PAAc revestidas com LPEI por meio de uma reação de amidação mediada por H_3BO_3 . Além disso, as micropartículas revestidas com LPEI (PAAc@LPEI) foram utilizadas como materiais de suporte para íons Cu^{2+} (PAAc@PEI/ Cu^{2+}). Para demonstrar a atividade catalítica das micropartículas do material foi realizada a síntese do composto 3-arilselanilindol 3a.

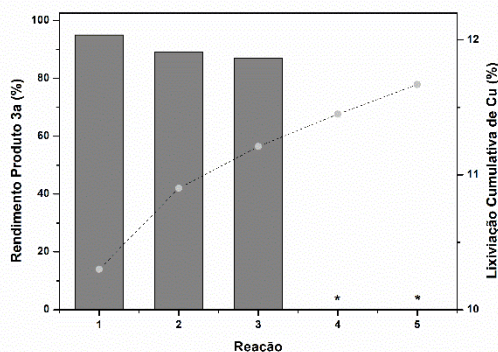
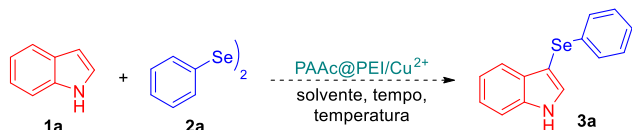


Figura 1-Rendimento do produto 7a e percentual de cobre lixiviado (valor acumulado) após cada ciclo reacional.

Conclusões

A atividade catalítica de PAAc@PEI/ Cu^{2+} foi examinada através de uma série de reações para sintetizar 3-arilselanilindols. A reação heterogênea mediada pelas micropartículas foi notavelmente mais eficiente que a catálise homogênea. As micropartículas PAAc@PEI/ Cu^{2+} apresentam um bom desempenho catalítico até três reações consecutivas.

Agradecimentos



Referências e notas

¹ I. Perevyazko, A. S. Gubarev, L. Tauhardt, A. Dobrodumov, G. M. Pavlov and U. S. Schubert, *Polym. Chem.*, 2017, **8**, 7169–7179.

² E. G. Zimmermann, S. Thurow, C. S. Freitas, S. R. Mendes, G. Perin, D. Alves, R. G. Jacob and E. J. Lenardão, *Molecules*, 2013, **18**, 4081–4090.

Análise da superfície de biofilmes de quitosana contendo erva-mate e sal de cobre(II)

Henrique Blank¹ (IC)*, Aline Joana Rolina Wohlmuth Alves dos Santos² (PQ). henriqueblank3@gmail.com

¹Universidade Federal de Pelotas (UFPEL) – curso de Farmácia Bacharelado

²UFPEL, Centro de Ciências Químicas Farmacêuticas e de Alimentos (CCQFA)

Palavras Chave: Extrato alcóolico, Biodegradável, Antimicrobiano, MEV, EDS

Introdução

Quitosana pode produzir filmes biodegradáveis por ser um polímero orgânico atóxico e solúvel em soluções ácidas, sendo um derivado sintético da quitina¹. É um polímero multifuncional com diversas aplicações, tais como carreador de fármacos e substâncias ativas em formulações². A quitosana evidencia atividade antibacteriana, bem como sua combinação com extrato hidroalcoólico de erva-mate, gelatina e sal metálico (Nitrato de prata - AgNO₃) para formulação de filmes para uso como embalagens biodegradáveis³. Outro composto com atividade antimicrobiana comprovada é o sulfato de cobre(II), utilizado na fruticultura na formulação da calda bordalesa⁴. Desta forma, o objetivo deste trabalho foi analisar a superfície de filmes previamente sintetizados no Laboratório de Sólidos Inorgânicos (LASIR), contendo quitosana (QUI), gelatina (GE), extrato hidroalcoólico de erva-mate (E) e sulfato de cobre(II) (Cu) por meio de microscopia eletrônica de varredura (MEV) e espectroscopia de raio X por energia dispersiva (EDS). Deve-se destacar que na literatura não foram encontradas publicações envolvendo a inserção conjunta de QUI, GE, E, Cu.

Resultados e discussão

A quitosana foi previamente sintetizada no LASIR¹. Os filmes foram produzidos pelo método de *casting*, variando a quantidade de extrato inserido em um volume total de 20 mL de solução filmogênica: 1(QUI), 3 (QUI, E130 µL), 4 (QUI, GE), 5 (QUI, GE, E130 µL), 10 (QUI, GE, E130 µL, Cu), 14 (QUI, E260 µL), 16 (QUI, GE, E260 µL), 20 (QUI, GE, E260 µL, Cu), 25 (QUI, Cu) e 28 (QUI, GE, Cu). Previamente as amostras de cada filme passaram por *sputtering* de ouro, 20 mA, 120 s. A MEV foi realizada com voltagem de aceleração 10 e 15 kV. A análise de EDS foi realizada com microsonda acoplada à MEV em magnificação de 1.000x (10 µm). As micrografias de MEV evidenciaram filmes homogêneos e sem presença

de poros, nas magnitudes de 1000, 5000 e 15000x, o que pode indicar que os componentes de cada formulação tiveram boa interação entre si, na formação dos filmes, da mesma maneira como relatado na literatura⁵. Não foram observadas mudanças físicas na superfície dos filmes, quando comparadas as suas diferentes constituições, exceto a mudança de coloração de incolor para verde, quando adicionado o extrato de erva-mate, e coloração verde escura quando acrescentados extrato e sal de cobre(II). Já, quando o filme de quitosana não contém extrato, e a ele foi acrescentado sal de cobre(II), a coloração passou de incolor para azul, referente à coloração do sal. Os filmes que contêm gelatina mostraram-se mais rígidos ao manuseio. A EDS evidenciou presença atômica de C, N, O, constituintes da matéria orgânica dos filmes, bem como presença de Cu.

Conclusões

Os filmes evidenciaram homogeneidade, sem presença de poros em sua superfície e indicaram porcentagem atômica dos elementos esperados. Estes biomateriais produzidos na forma de filmes estão sendo avaliados quanto à sua aplicabilidade biológica antimicrobiana.

Agradecimentos

Ao grupo LASIR. FAPERGS pela bolsa de iniciação científica. NAMITEC (CNPq 406193/2022-3).

Referencias e notas

- (1) BLANK, H. et al. *Energias renováveis e valorização de resíduos: o caminho para a sustentabilidade*. Rio de Janeiro: Editora e-publicar, **2022**, 7, 82.
- (2) AHSAN, S.M. et al. *Int. J. Biol. Macromol.* **2018**, 110, 97.
- (3) JAMRÓZ, E. et al. *Polym.* **2022**, 14, 20.
- (4) CIPOLETA, N.S.; SILVA, L.F.S.; LOPES-ASSAD, M.L.C. *Ambiência*, **2019**, 15, 2.
- (5) EL KNIDRI, H. et al. *Process Saf. Environ. Prot.*, **2016**, 104, 395.

Scaffold cerâmico impregnados com fluoreto de cálcio para uso como cimento ionômero de vidro (CIV)

Ellen Bitencourt Moreira^{1*} (IC), Elvio Antônio de Campos¹ (PQ) e Silvia Denofre de Campos¹ (PQ).

ellen.moreira002@gmail.com

Universidade Estadual do Oeste do Paraná, Toledo/PR. Jardim La Salle,3141.

Palavras Chave: Bioatividade, Vidro, Cimento, Hidroxiapatita, Restauração.

Introdução

Os cimentos ionômeros de vidro (CIV) são materiais muito importantes utilizados em restaurações odontológicas. Este material é normalmente constituído de um pó de fluoroaluminossilicato e um ácido carboxílico. Quando o CIV tem em sua composição um vidro bioativo (pó) este promove uma exclusiva interação entre o tecido do dente e o CIV, por meio de reações de trocas que levam a formação de uma camada de hidroxiapatita entre o dente e CIV aumentando a bioatividade do sistema. Nesse processo íons fluoretos são liberados no meio quando presente no biomaterial o que auxilia na prevenção de cáries. Os vidros bioativos podem ser reforçados pela adição de metais, tais como o zinco que incorporado a rede vítrea pode atribuir ao vidro ação antibacteriana.

Neste trabalho, CIVs foram obtidos através da reação dos *scaffolds* obtidos a partir do biovidro de composição SiO₂-CaO-P₂O₅-ZnO (VZn) impregnado com CaF₂ e ácido poliacrílico. Os precursores e os cimentos foram caracterizados por espectroscopia vibracional no Infravermelho com transformada de Fourier (IR-FT) e difratometria de raio X de pó (DRX) e testes de solubilidade e liberação de íons fluoretos.

Resultados e discussão

Para a produção do vidro bioativo foi utilizado o método sol-gel, o qual é baseado em reações de polimerização inorgânica tendo como precursor da rede vítrea o Tetraortossilicato, TEOS, Ca(NO₃)₂, Zn(NO₃)₂ e ácido fosfórico. Os *scaffolds* sintetizados a partir do biovidro, foram obtidos misturando celulose ao vidro (20/80 % m/m) e calcinando. Os CIVs sintetizados, do biovidro e dos *scaffolds* foram obtidos na proporção 1:1 sólido/líquido.

O difratograma de raio X do vidro sintetizado VZn mostra picos de difração em 2θ iguais a 26,8°, 30,7° e 33,4°, característicos de fases de hidroxiapatitas (HA), picos na região de 2θ entre 49° e 62°, referentes ao ZnO e picos característicos de CaSiO₃ (wollastonita) em 29,3°, 40,4°,

42,0°, 50,4°, 51,4° e 53,0°. indicando organização do sólido e as fases cristalinas predominantes

Nos espectros IR-FT das amostras do vidro e do *scaffold* foram identificadas as bandas características de estiramentos simétricos e assimétricos das ligações Si-O-Si em 1200-1060 cm⁻¹ e em 960 cm⁻¹ Si-OH característicos das diferentes interações dos tetraedros SiO₄ na rede vítrea. Quando observamos o espectro após a formação dos cimentos ionômero de vidro (CIV) o surgimento de bandas em 1570 e 1420 cm⁻¹ referentes aos estiramentos assimétrico e simétrico das ligações C-O indicam que houve reação entre o ácido poliacrílico e o metal constituinte do sólido.

O tempo de trabalhabilidade para a formação dos cimentos sintetizados variou entre 90 s e 120 s, superior ao do cimento comercial que é em média de 90 s. Contudo, o tempo de presa observado foi de 30 min., o dobro do observado para os CIVs comerciais de 15 min. Submetendo os CIVs preparados à luz UV o tempo de cura passa a ser de 20 min.

Estudos de solubilidade dos CIV sintetizados indicam uma perda de massa que se estabiliza em 24 % ao longo de 30 dias. A liberação de íons F⁻ pelo cimento est relacionada também ao tempo de exposição ao meio reacional sendo que foi observado uma concentração de íons fluoreto de 0,90 mg.L⁻¹ após 7 dias, 1,10 mg.L⁻¹ após 15 dias e valores constantes para íons fluoretos após 30 dias.

Conclusões

Os *scaffolds* obtidos do vidro VZn mostraram-se efetivos para utilização como cimentos ionômeros de vidro (CIV). O CIV apresenta liberação controlada de íons fluoreto podendo atuar como agente anticariogênico.

Agradecimentos

À Unioeste e à Fundação Araucária pela bolsa de Iniciação Científica concedida.

Referencias e notas

(1) Agarwal, P., Nayak, R., Upadhyaya, N.P., Gijupall, K., Gupta, L. *Materials Today: Proceedings*.2018, 5, 16065.

Plataforma baseada em nanopartículas de ouro recobertas com N-(2-hidroxi)propil-3-trimetilamônio quitosana para terapia fototérmica e fotodinâmica.

Patrícia Sangaletti¹(PG), Eduardo V. Bergmann²(PG), Guilherme N. Vieira³(PG), Adolfo H. Junior¹(PQ), Luis C. Malacarne²(PQ), Alfeu Z. Filho³(PQ), Adriana P. Gerola¹(PQ)*.

*adriana.gerola@ufsc.br

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Santa Catarina, Brasil

²Departamento de Química, Universidade Estadual do Maringá, Paraná, Brasil

³Departamento de Microbiologia, Imunologia e Parasitologia, Universidade Federal de Santa Catarina, Santa Catarina, Brasil.

Palavras Chave: Azul de metileno, Nanopartículas de ouro, Espécies reativas de oxigênio, Oxigênio singlete, Câncer de mama.

Introdução

A combinação entre terapia fotodinâmica (TFD) e terapia fototérmica (TFT) é uma alternativa para o tratamento de câncer. Essas terapias baseiam-se no emprego de luz de comprimento de onda específico e de uma espécie fotoativa que absorve esta luz (fotossensibilizador, FS) e, a partir disso, é capaz de causar citotoxicidade (gerando espécies reativas de oxigênio (EROs) ou calor). Em geral, os FS são encapsulados em sistemas de entrega e sua ativação depende do emprego da luz. Quando o tamanho final dos sistemas é inferior a 300 nm, beneficiam-se do direcionamento passivo, acumulando-se preferencialmente nos tecidos cancerosos.¹ Aqui, propomos a síntese de uma nanopartícula de ouro (AuNP) estabilizada com citrato e funcionalizada com o FS azul de metileno (AM), revestida com o polímero catiônico cloreto de N-(2-hidroxi)propil-3-trimetilamônio quitosana (HTCC), dando origem ao conjugado HTCC-AM-AuNPs. O AM é inativo em meio fisiológico, não sendo possível aplicá-lo em sua forma livre.² O conjugado foi caracterizado quando ao seu tamanho, Potencial Zeta, perfil de absorção UV-Vis, capacidade de produção de EROs e oxigênio singlete (¹O₂), capacidade de conversão de energia absorvida em calor, e quanto a sua citotoxicidade *in vitro* contra células de câncer de mama MDA-MB231, no escuro e na presença da luz.

Resultados e discussão

O conjugado HTCC-AM-AuNPs foi formado a partir de interações eletrostáticas entre seus componentes. Apresentou absorção de luz visível no intervalo entre 500-800 nm, observando-se as bandas características do AM (665 nm) e das AuNPs (530 nm). O tamanho final obtido é compatível com o direcionamento passivo almejado (150 nm), e o Potencial Zeta positivo (+26 mV) encontrado favorece uma maior retenção do formulado nas células. Estudos fotoquímicos empregando ácido úrico como sonda (laser 660 nm, 100 mW cm⁻²) revelaram que o conjugado HTCC-AM-AuNPs é capaz

de produzir EROs e ¹O₂, assim como o AM livre. Espectroscopia de ressonância paramagnética eletrônica confirmou a formação de radical hidroxila •OH como uma das principais EROs geradas. Análises de lentes térmicas revelaram que o conjugado é capaz de converter cerca de 25% da energia absorvida em calor, propriedade associada à banda plasmônica das AuNPs.³ HTCC-AM-AuNPs mostrou citotoxicidade significativa na presença do foto estímulo contra células MDA-MB231 (Figura 1), com baixa toxicidade no escuro.

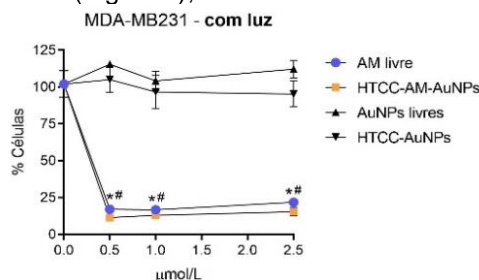


Figura 1. Testes *in vitro* com aplicação de luz.

Conclusões

A plataforma sintetizada mostrou pequeno tamanho, carga superficial positiva, e capacidade de geração de espécies reativas de oxigênio (citotóxicas) e calor. Os resultados *in vitro* indicam o potencial do sistema HTCC-AM-AuNPs para TFD e TFT combinadas em futuras aplicações *in vivo*.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, INCT-Catálise, FAPESC UFSC e LaCFI.

Referências e notas

- (1) Wei, X.; Chen, H.; et al. *ACS Appl. Nano Mater.* **2018**, 1, 7, 3663.
- (2) Vilsinski, B. H.; Souza, P. R.; et al. *Mater. Today Commun.* **2021**, 26, 101889.
- (3) Abed, A. S.; et al. *Results Chem.* **2023**, 5, 100848.

Filme de β -ciclodextrina/curcumina com potencial uso no tratamento de melanoma

Nicolas Mailahn (IC)*; Matheus Gularte (PG); Rafael Quadrado (PG); André Fajardo (PQ)

(*) nicolasperle0@gmail.com

Laboratório de Tecnologia e Desenvolvimento de Compósitos e Materiais Poliméricos (LaCoPol), Universidade Federal de Pelotas (UFPEL), Campus Capão do Leão s/n, 96010-900, Pelotas-RS, Brasil.

Palavras-Chave: Curcumina, amido catiônico, complexo de inclusão, atividade antitumoral, melanoma.

Introdução

O melanoma, um câncer agressivo, pode ser tratado com a curcumina (CUR), um polifenol extraído do açafrão-da-terra, conhecido por suas propriedades antioxidantes, anti-inflamatórias e antitumorais¹. Para melhorar sua solubilidade em meio fisiológico, a CUR pode ser encapsulado na β -ciclodextrina (β -CD), que possui uma estrutura hidrofílica externa e uma cavidade interna hidrofóbica. Os complexos β -CD/CUR, por sua vez, podem ser incorporados em matrizes poliméricas constituídas de poli(álcool vinílico) (PVA) e amido catiônico (CS), permitindo assim controlar sua liberação. Esse sistema pode oferecer maior eficácia terapêutica e redução de efeitos colaterais no tratamento de melanoma².

Resultados e discussão

A partir das imagens obtidas por microscopia eletrônica de varredura (MEV), pode-se notar que os filmes com β -CD e β -CD/CUR (Figura 1) exibem superfícies uniformes. Entretanto, a Figura 1b demonstra que a adição do complexo β -CD/CUR não apenas causou um aumento na rugosidade da superfície do filme, mas também revelou uma dispersão uniforme do complexo.

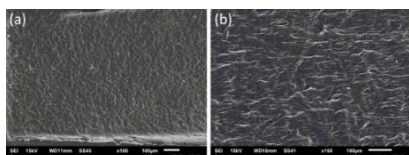


Figura 1. Imagens de MEV para (a) filme β -CD e (b) filme β -CD/CUR.

No espectro de FTIR da CUR, foram identificadas bandas em 3510 cm^{-1} (O-H dos grupos fenólicos) e 1605 cm^{-1} (C-C de anel aromático). O espectro da β -CD exibiu bandas características em 3200 cm^{-1} (O-H) e 1650 cm^{-1} , 1150 cm^{-1} e 1027 cm^{-1} , (H-O-H, C-O e C-O-C). Nos espectros dos filmes, a banda em 1430 cm^{-1} indicou a presença do CS, juntamente com bandas características do PVA. No filme com o complexo β -CD/CUR, não foram detectadas bandas da CUR,

porém alguns grupos funcionais apresentaram deslocamentos na região de $3300\text{--}3310\text{ cm}^{-1}$ e $1650\text{--}1630\text{ cm}^{-1}$. No padrão de difração de raios-x (DRX) da CUR (Figura 2b), tem-se picos nos ângulos de 2θ iguais a $21,26^\circ$, $23,35^\circ$ e $24,68^\circ$, enquanto a β -CD apresentou seus próprios picos cristalinos característicos. Ao analisar os filmes β -CD e β -CD/CUR, observou-se apenas os picos dos materiais precursores, incluindo o pico do PVA em 20° . A ausência dos picos correspondentes à β -CD e CUR sugere uma eficiente encapsulação no filme, devido à complexação.

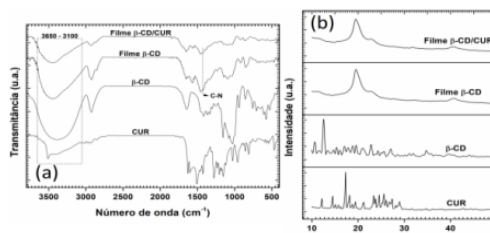


Figura 2. Espectro de FTIR (a) e padrões de DRX (b) para CUR, β -CD, filme β -CD e filme β -CD/CUR.

Conclusões

As imagens obtidas por MEV evidenciaram que a incorporação do complexo altera a morfologia do filme enquanto as análises de FTIR e DRX confirmaram a presença do complexo β -CD/CUR na matriz polimérica. Na sequência, o material desenvolvido será testado *in vitro* quanto à sua atividade antitumoral.

Agradecimentos

À UFPEL, aos órgãos de fomento (CNPq e CAPES) e à comissão organizadora da 29ª SBQSUL.

Referências e notas

- DEV, A.; SRIVASTAVA, A.K.; CHOUDHURY, S.R.; KARMAKAR, *RSC Adv.*, 6 (2016) 95165.
- GUO, M.Y.; ZHOU, G.Q.; LIU, Z.; LIU, J.; TANG, J.L.; XIAO, Y.T.; XU, W.S.; LIU, Y.; CHEN, C.Y. *Sci. Bull.* 63 (2018) 92.

Design de clusters bimetalícos suportados: um estudo *ab initio* da estabilidade e do potencial catalítico

Gabriel Reynald da Silva^{1*} (PG), Maurício Jeomar Piotrowski² (PQ), Alexandre Cavalheiro Dias³ (PQ), Henrique Ribeiro da Silva¹ (IC), Diego Guedes-Sobrinho¹ (PQ)

¹Departamento de Química, Universidade Federal do Paraná, CEP 81531-980, Curitiba, PR, Brasil. Email: gabriel.reynald@ufpr.br

²Departamento de Física, Universidade Federal de Pelotas, CEP 96010-900, Pelotas, RS, Brasil.

³Instituto de Física, Universidade de Brasília, CEP 70919-970, Brasília, DF, Brasil.

Palavras Chave: Clusters bimetalícos, Grafeno, Teoria do funcional da densidade.

Introdução

Nanocatalisadores bimetalícos têm se mostrado promissores pela sua performance aprimorada em comparação aos seus homólogos monometalícos^[1,2], demandando mais estudos sobre sua estabilidade, causalidade e dinâmica. Assim, no presente trabalho, investigamos as propriedades estruturais, eletrônicas e de reatividade de clusters de $M_{(n-x)}Au_x$, com $M = Ni, Pd, Pt, Cu$ e Ag , para atomicidades (n) $n = 1 - 5$, no vácuo e suportados em grafeno (Gr) por meio de cálculos *ab initio* fundamentados na teoria do funcional da densidade (DFT).

Resultados e discussão

A energia de excesso (E_{exc}) compara a estabilidade relativa entre clusters bimetalícos e seus respectivos monometalícos, com valores negativos (positivos) implicando em uma mistura favorável (desfavorável). Os resultados de E_{exc} para as composições (x), representados na figura 1, indicam que as ligas de NiAu, CuAu, AgAu no vácuo são estáveis. Já para PdAu, no aumento de n , a E_{exc} diminui, com predomínio de morfologias de mais alta coordenação, como mostra a figura 2(b). As ligas PtAu no vácuo sempre são desfavorecidas, com tendência à segregação de fase. Resultados preliminares do efeito da adsorção em Gr indicam significativas mudanças na E_{exc} para $n = 2$ e 3, resultado da alteração na interação entre os átomos metálicos devido às novas interações com o substrato. Conforme a análise de população de carga, o contato do cluster com o Gr aumenta a interação eletrostática entre os metais, com transferência de carga das espécies M 's para Au e C ligados diretamente a eles, formando uma ponte Au-M/Gr parcialmente

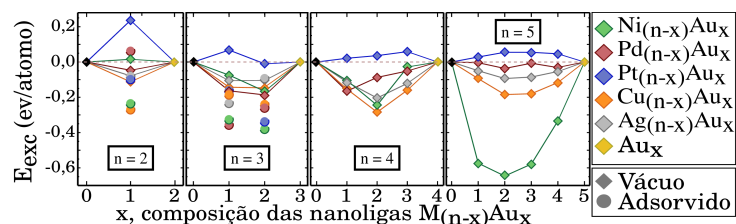


Figura 1. Energia de excesso (E_{exc}) em função da composição da liga (x), atomicidade (n) e espécie química.

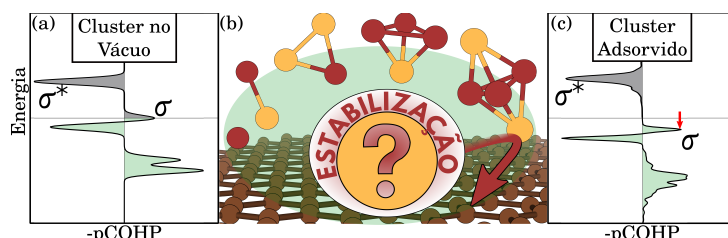


Figura 2. (a) e (c) COHP de Cu_1Au_1 , e (b) estruturas de cluster $Pd_{(n-x)}Au_x$.

te catiônica. A análise de *crystal orbital hamilton populations* (COHP) revela que o aumento da população de estados ligantes (antiligantes) justifica a estabilização (desestabilização) da nanoliga, cujo mecanismo é exemplificado na figura 2(a,c). O centro da banda d (ϵ_d), um indicativo do potencial catalítico para valores o quanto menores, dos sistemas com Cu e Ag (Ni e Pd) no vácuo tem sua energia aumentada (diminuída) em relação ao nível de Fermi, enquanto Pt pouco é afetada. A adsorção em Gr potencializa a modulação de ϵ_d de todos os sistemas, incluindo Pt, com diminuição de $\sim 0,6$ eV.

Conclusões

A estabilidade de clusters metálicos quando suportados ocorre por interações fortes o suficiente para ancorá-los, mas não o bastante para que a interação metálica seja desfavorecida. A modulação da atividade catalítica pelo heteroátomo de Au é potencializada na adsorção em grafeno. A continuação deste estudo se concentrará na investigação de como o crescimento dos clusters afeta essas dinâmicas.

Agradecimentos

À CAPES pelo financiamento e ao LCPAD-UFPR, NACAD-UFRJ, CENAPAD-Unicamp e SENAI-CIMATEC pelo recurso computacional.

Referências e notas

- (1) GUEDES-SOBRINHO, D. *et al. Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2022**, 24, 6515-6524.
- (2) GUEDES-SOBRINHO, D. *et al. J. Phys. Chem. C.*, **2017**, 121, 27721-27732

Caracterização Eletrônica de Perovskitas de Haleto quasi-2D com Potencial Aplicação em Células Solares

Danilo Neves Silveira^{1*} (PG), Luis Octavio de Araujo¹ (PG), Marco A. A. Queiroz¹ (IC), Jônatas F. Dalmedico² (PG), Maurício Jeomar Piotrowski² (PQ), Celso R. C. Rêgo³ (PQ), Wolfgang Wenzel³ (PQ), Diego Guedes-Sobrinho¹ (PQ). e-mail*: daniloneves@ufpr.br

¹ Universidade Federal do Paraná, Departamento de Química, Curitiba/PR, Brasil;

² Universidade Federal de Pelotas, Departamento de Física, Pelotas/RS, Brasil;

³ Instituto de Tecnologia Karlsruhe, Instituto de Nanotecnologia Hermann-von-Helmholtz-Platz, Karlsruhe, Alemanha.

Palavras-Chave: Perovskitas de haleto, Energia de *bandgap*, Teoria do funcional da densidade, Estrutura eletrônica.

Introdução

O estudo das perovskitas de haleto quasi-2D (2D-MHP) de Zn¹⁺ para aplicação em materiais fotovoltaicos estáveis e ecológicos é desafiador devido à complexidade de sua estrutura eletrônica, principalmente em relação ao cálculo do *bandgap*. No presente trabalho, foram caracterizados a estrutura cristalina, eletrônica e estabilidade usando cálculos *ab initio* (DFT-PBE) com correções de van der Waals (D3, D3BJ), spin-órbita (SOC), juntamente com a correção DFT-1/2,² aplicada de modo a considerar ponderadamente as contribuições dos orbitais de valência e condução. A metodologia aplicada obteve resultados com excelente concordância com valores experimentais para outras classes de MHPs.^{3,4}

Resultados e discussão

Foram analisadas as contribuições dos orbitais que compõem a banda de valência e banda de condução dos sistemas Cs₂ZnX₄ (X = Cl, Br) e Cs₂ZnY₂X₂ (X = Cl, Y = Br, I) para a correção de *bandgap*. Nos dois tipos de sistema, foram identificados diferentes tipos de contribuição para os orbitais da valência. Para Cs₂ZnX₄, observa-se contribuição total dos orbitais p dos haleto do plano **ab**. Para os sistemas Cs₂ZnY₂X₂, foi identificado uma contribuição majoritária dos haleto Y (direção **c**). Aplicando a correção de *bandgap* apenas para os haleto do plano **ab** para o primeiro sistema e de forma ponderada considerando a contribuição no segundo tipo, obteve-se valores com excelente concordância aos medidos experimentalmente. Os principais resultados relativos ao trabalho estão apresentados na Figura 1. Ademais, pode-se estender a correção para sistemas que ainda não foram sintetizados, a exemplo do Cs₂ZnBr₄, demonstrando um bom caráter preditivo.

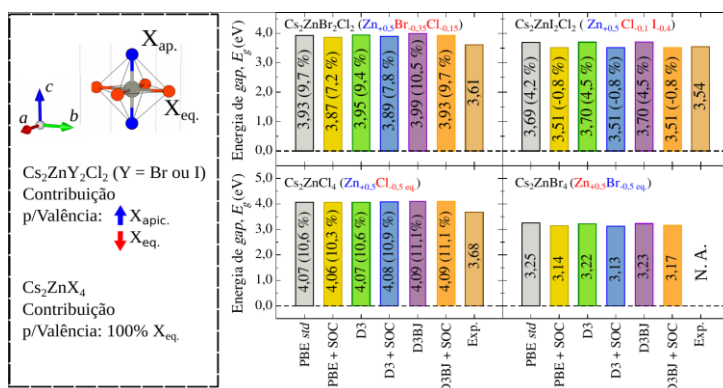


Figura 1: Representação esquemática do posicionamento dos haleto nas 2D-MHPs, bem como os *bandgaps* calculados com as correções mencionadas e respectivos desvios do experimental. Os valores em vermelho e azul são as correções aplicadas para a valência e condução, respectivamente.

Conclusões

Nossa abordagem empregou com sucesso a correção DFT-1/2 para caracterizar a estrutura eletrônica das 2D-MHPs de Zn com ambientes químicos complexos. Obteve-se valores de *bandgap* em excelente concordância com dados experimentais e demonstrando a eficácia da metodologia.

Agradecimentos

UFPR, PPGQ-UFPR. CAPES, LCPAD-UFPR, NACAD-UFRJ, CENAPAD-Unicamp e SENAI-CIMATEC.

Referências e notas

- (1) SHANKAR, Hari; GHOSH, Sukanya; KAR, Prasenjit. *J. Alloys. Compd.* **2020**, 844, 156148.
- (2) FERREIRA, Luiz G.; MARQUES, Marcelo; TELES, Lara K. *Phys. Rev. B.* **2008**, 78, 125116.
- (3) Guedes-Sobrinho, D., Neves Silveira, D., de Araujo, L. O., D. et al. *Sci. Rep.* **2023**, 13, 4446.
- (4) de Araujo, L. O., Rêgo, C. R., Wenzel, J. et al, *Comput. Chem.* **2023**, 44, 1395.

Desenvolvimento de Eletrocatalisadores de Níquel Suportado em Grafeno Funcionalizado para Potencial Aplicação em Células a Combustível de Líquido Direto

Lízia A. X. Bulin¹(PG)*, Brenda Koch¹(IC), Antônio M. Spricigo¹(IC), Eduardo G. C. Neiva²(PQ), Daniela Z. Mezalira¹(PQ)

*lizia.alana@posgrad.ufsc.br

¹ Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil² Departamento de Química, Universidade Regional de Blumenau, Blumenau, Brasil

Palavras Chave: eletrocatalisadores, grafeno, níquel, células a combustível, glicerol

Introdução

A funcionalização do grafeno com grupos oxigenados e/ou nitrogenados proporciona a formação de suportes mais reativos facilitando a deposição de nanopartículas metálicas em sua superfície. Nesse trabalho foram sintetizados eletrocatalisadores de níquel empregando suportes catalíticos de grafeno comercial (Ni/G), óxido de grafeno (Ni/GO) e óxido de grafeno nitrogenado (Ni/NGO) por meio do método poliol. A atividade catalítica desses materiais foi avaliada na reação de eletro-oxidação do glicerol demonstrando promissora aplicação na geração de energia elétrica renovável, por meio de células a combustível de líquido direto.

Resultados e discussão

Na **Figura. 1** estão os resultados da caracterização por análise termogravimétrica (TGA), difração de raios X (DRX), microscopia eletrônica de transmissão (MET) e absorção atômica (AAS).

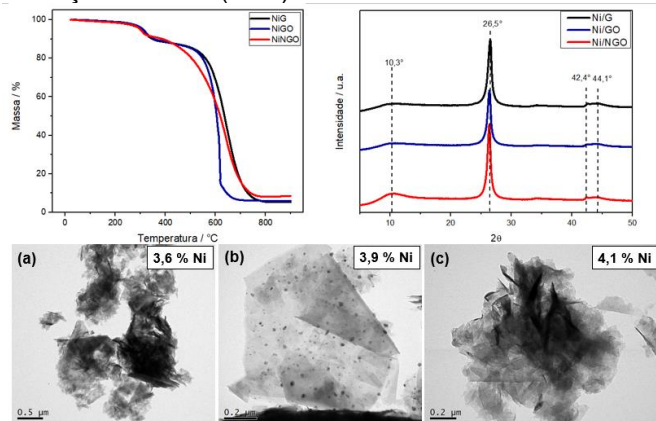


Figura 1. TGA, DRX e MET das amostras de (a) Ni/G, (b) Ni/GO e (c) Ni/NGO

Os resultados de TGA e DRX indicaram a formação de Ni(OH)₂. AAS indicou que o material Ni/NGO possui maior quantidade de Ni. As imagens de MET indicaram a presença de aglomerados de Ni(OH)₂ com a formação de nanopartículas de níquel apenas no material Ni/GO. As reações de eletro-oxidação do glicerol foram

acompanhadas por voltametria cíclica (VC), **Figura. 2**, realizadas em KOH 1,0 mol L⁻¹ e 0,1 mol L⁻¹ de glicerol.

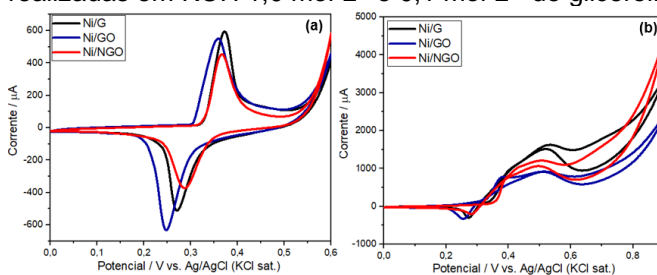


Figura 2. Voltamogramas dos materiais (a) na ausência de glicerol, (b) na presença de glicerol.

Os voltamogramas, sem glicerol, apresentaram os picos característicos de oxidação/redução do níquel. Na presença do álcool, o NiOOH formado pela oxidação da espécie Ni(OH)₂ é responsável pela oxidação do glicerol, seguindo o mecanismo proposto por Fleischmann¹. Os estudos eletroquímicos mostraram que todos os materiais foram ativos frente a oxidação do glicerol, sendo Ni/G o que apresentou o maior valor de corrente.

Conclusões

Todos os eletrocatalisadores de níquel suportado em grafeno funcionalizado apresentaram potencialidades para futuras aplicações em células a combustível.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, FAPESC, UFSC, FURB, LCME-UFSC, LEMA/LARES e Central de Análises Depto QMC-UFSC.

Referências e notas

- (1) Houache, M. S. E., Cossar, E., Ntais, S., & Baranova, E. A. *Journal of Power Sources*, **2018**. 375, 310-319.

Potencial sistema carreador de fármacos baseado em nanopartículas de complexos de polieletrólitos de ácido hialurônico/poli (cloreto de dialildimetilamônio)

Tiago Ryan B. Quinalia (IC)¹, Guilherme L. Batista Neto (PG)^{1*}, Rosecler S. Klein (PG)¹, Bruno R. Machado (PG)¹, Paulo R. Souza (PQ)³, Alessandro F. Martins (PQ)^{1, 2, 4}. g.luizbatista15@gmail.com

¹Departamento de Química, UEM; ²Departamento de Química, UTFPR-Apucarana; ³Departamento de Física, UFSM, ⁴ Chemistry and Biochemistry Department, University of Wisconsin-River Falls.

Palavras Chave: Nanociência, Carboidratos, Sais de amônio quaternário.

Introdução

Complexos de polieletrólitos (PECs) são utilizados para obter sistemas carreadores de fármacos (SCFs) devido à suas propriedades responsivas a estímulos, como, por exemplo, marcadores de contaminação, como enzimas liberadas por bactérias e mudanças de pH e temperatura¹. O ácido hialurônico (HA) quando constituinte de PECs, confere a estes a habilidade de se ligar com glicoproteínas transmembranas CD44, superexpressas em células de câncer². Essa interação HA/CD44 diante de células tumorais tem sido objetivo em trabalhos que visam aumentar a concentração de fármacos encapsulados PECs a base de HA³.

Neste trabalho foram obtidas nanopartículas de complexos de polieletrólitos (PCNs) baseadas em HA e poli (cloreto de dialildimetilamônio) (PDADMAC), um potencial agente antimicrobiano⁴ resultando em um SCF para tratar células cancerosas em potencial.

As PCNs foram obtidas por adições *one-shot* de soluções de polieletrólitos (PEs) filtradas em filtros de 0,22 µm com concentrações de 0,3, 0,6 e 0,9 mg/mL. Foram utilizadas 3 proporções volume/volume para as soluções de PEs a serem misturadas, 1/3, 1/6 e 1/9. Os experimentos foram realizados em pH 7,4 e 5,6. Depois de misturadas, a solução resultante foi mantida sob agitação a 1000 rpm por 3h. O raio hidrodinâmico (R_h) e potencial Zeta (ζ) das suspensões contendo os SCFs foram analisados por espalhamento dinâmico de luz

Resultados e discussão

Os resultados associados às medidas de R_h e ζ com as suspensões das nanopartículas estão apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Medidas de R_h e ζ das PCNs em suspensão.

	pH = 7,4		pH = 5,6	
	R_h (nm)	ζ (mV)	R_h (nm)	ζ (mV)
HANp0,3.1/3	1050 ± 84	-15 ± 1	375 ± 77	-11 ± 1
HANp0,3.1/6	1265 ± 52	-16 ± 1	576 ± 1	-18 ± 1
HANp0,3.1/9	578 ± 10	-17 ± 1	388 ± 6	-19 ± 1

HANp0,6.1/3	758 ± 43	-14 ± 1	188 ± 12	-11 ± 1
HANp0,6.1/6	991 ± 6	-17 ± 1	625 ± 13	-19 ± 1
HANp0,6.1/9	700 ± 13	-18 ± 1	368 ± 4	-20 ± 1
HANp0,9.1/3	3262 ± 121	-14 ± 1	594 ± 94	-10 ± 2
HANp0,9.1/6	1105 ± 20	-18 ± 1	595 ± 4	-19 ± 1
HANp0,9.1/9	701 ± 8	-18 ± 1	441 ± 2	-20 ± 1

A nomenclatura das amostras é dada da forma: HANp[concentração das soluções de PE].[proporção V/V entre as soluções]

Um valor de ζ negativo evidencia a presença do HA na parte externa da partícula, além da sua estabilidade em solução devido à repulsão das cargas negativas superficiais das partículas. As partículas obtidas na condição de pH 5,6 apresentam menor R_h (188 nm), ocorrendo com uma dimensão nanométrica. Por sua vez, partículas preparadas em pH 7,4 ocorrem maior R_h , apresentando um diâmetro correspondente a escala micrométrica.

Conclusões

O presente trabalho mostra a possibilidade de formação das PCNs de HA/PDADMAC por um método simples. Além disso, estudos posteriores podem avaliar a potencial aplicação desse sistema como SCF.

Agradecimentos

Os autores agradecem a CAPES, CNPq e Symbios, pelos recursos e materiais concedidos.

Referências e notas

- (1) Antropenko, A.; Caruso, F.; Fernandez-Trillo, Paco. *Macromol. Biosci.* **2023**, 2300123
- (2) Li, D., Wang, X., Han, K., Sun, Y., Ren, T., Sun, G., ... & Zhong, R. *Int. J. of Bio. Mac.* **2023**, 246, 125657.
- (3) Yang, L., Gao, S., Asghar, S., Liu, G., Song, J., Wang, X., ... & Xiao, Y. *Int. J. of Bio. Mac.* **2015**, 72, 1391-1401.
- (4) de Carvalho, G. R., Kudaka, A. M., Netto, R. A., Delarmelina, C., Duarte, M. C. T., & Lona, L. M. F. *Int. J. of Bio. Mac.* **2023**, 125388.

Otimização de nanopartícula inovadora para o carregamento de biomoléculas

Júlia da Fontoura*,^a (IC) (juliafo@ufcspa.edu.br), Flávia Pires Peña^b (PG), Tanira Alessandra Silveira Aguirre^b (PQ)

^a Curso de Química Medicinal, Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre. 90050-170, Porto Alegre, RS, Brasil.

^b Programa de Pós-Graduação em Biociências, Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre. 90050-170, Porto Alegre, RS, Brasil.

Palavras Chave: Nanopartícula, pH, Babaçu, Drug delivery.

Introdução

As nanopartículas são sistemas carreadores de fármacos que apresentam diâmetro inferior a 1 μm . O uso de nanopartículas poliméricas (NPs) para liberação controlada e direcionada de substâncias bioativas tem mostrado potencial terapêutico significativo. Existem diferentes tipos e métodos de preparo de nanopartículas, como é o caso de NPs obtidas por nanoprecipitação¹. Anteriormente foi desenvolvida uma formulação de NPs pelo grupo de pesquisa, com a inclusão do óleo de babaçu² e posteriormente o grupo trabalhou na inclusão de um polímero pH sensível. Aqui, foram realizadas alterações nos componentes, visando um aumento do núcleo das NPs de forma a obter uma nova NP otimizada para a incorporação de biomoléculas, cabe ressaltar que foram realizadas duplicatas das formulações.

Resultados e discussão

O desenvolvimento das NPs foi realizado pelo método de nanoprecipitação modificado, contendo óleo de babaçu, Span[®] 80, etanol, copolímeros de ácido metacrílico e acrilato de etila (DAMAE), Tween[®] 80 (1:3:200:11:12) e soluções tampão para 35 mL. Duas novas NPs foram obtidas com aumento da quantidade de óleo de babaçu, as NP1 e NP2 foram caracterizadas quanto ao diâmetro, índice de polidispersão e potencial zeta.

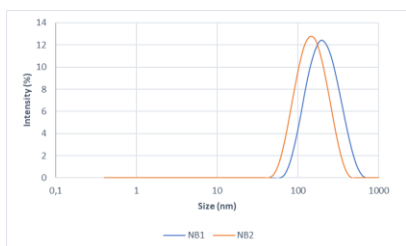


Figura 1. Distribuição de tamanho de partícula por espalhamento de luz dinâmico das formulações NP1 e NP2.

É possível observar pelo gráfico de distribuição de tamanho obtido pela técnica de espalhamento de luz dinâmico que ambos os lotes de nanopartículas estão

unicamente na faixa nanométrica, com $142,9 \text{ nm} \pm 2,4$ de diâmetro e são homogêneos, pois possuem baixa polidispersão ($0,226 \pm 0,007$). O potencial zeta foi $-3,82 \text{ mV} \pm 0,17$, que está de acordo com as características do polímero. Além disso, as formulações apresentaram-se estáveis visualmente, sem precipitados e coloração levemente esbranquiçada.

Conclusões

Foi possível aumentar o percentual mássico dos componentes que formam o núcleo da nanopartícula em comparação a formulações anteriormente preparadas. Isso possivelmente possibilitará a encapsulação de uma quantidade maior de biomoléculas no núcleo mantendo a estabilidade das partículas.

Agradecimentos

Agradeço a Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre, juntamente ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pela oportunidade e os meios oferecidos.

Referências e notas

- (1) Schaffazick SR, Guterres SS, Freitas L de L, Pohlmann AR. Caracterização e estabilidade físico-química de sistemas poliméricos nanoparticulados para administração de fármacos. *Quim Nova*. 2003;26(5):726–37.
- (2) RAUPP, V. et al. Polymeric nanoparticles containing babassu oil: A proposed drug delivery system for controlled release of hydrophilic compounds. v. 253, p. 105304–105304.

Estudo da Adsorção de Metais na Superfície de Polímeros modificados em Leito Fotoquímico

Caroline Pereira Roldão¹(PG)*, Carlos Alberto Severo Felipe¹(PQ), Felipe Kessler¹(PQ), Vanessa Bongalardo Mortola¹(PQ).

*roldaocarolinee@gmail.com

¹ Universidade Federal do Rio Grande – Campus Carreiros - Av. Itália, km 8, bairro Carreiros, Rio Grande, RS

Palavras Chave: Adsorção, Fotofuncionalização, Leito Fluidizado, Polietileno

Introdução

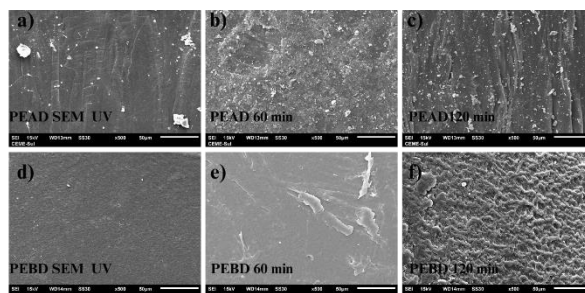
O crescimento urbano e industrial causam poluição por metais nocivos, ameaçando a saúde e segurança dos seres vivos. Dentre as técnicas de remoção de metais de meios aquosos, a adsorção é uma técnica simples e eficiente, sendo os microplásticos estudados como potenciais adsorventes¹. A eficácia da adsorção depende da interação entre a superfície do adsorvente e os íons da solução, que pode ser melhorada com a modificação da superfície. O uso de radiação ultravioleta (UV) em polímeros é uma técnica econômica, de fácil aplicação e ambientalmente amigável para melhorar as características da superfície do adsorvente². Aumentar a capacidade de adsorção envolve a geração de radicais livres que interagem com o oxigênio, criando novos radicais e grupos químicos na superfície³. Esses grupos são capazes de interagir com íons metálicos através do processo de complexação. O objetivo do presente trabalho é avaliar a adsorção de metais na superfície de *pellets* de polietileno de baixa densidade (PEBD) e polietileno de alta densidade (PEAD) previamente expostos à radiação ultravioleta de forma controlada.

Resultados e discussão

Pellets de PEBD e PEAD foram expostos a radiação UV em um leito fluidizado por 60 min e 120 min. Após o tratamento, foram preparadas soluções contendo íons metálicos de 0,1 M e misturadas a fim de avaliar o processo de adsorção durante 60 min. Os resultados obtidos foram avaliados utilizando as técnicas de ângulo de contato com a água (WCA), Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV) e Espectrometria de Fluorescência de Raios-X por Energia Dispersiva (EDXRF). Através do WCA verificou-se que o ângulo de contato para ambos os polímeros diminuiu, indicando que a superfície se tornou hidrofílica. O ângulo de contato do PEAD foi de 92,22° para 65,40° em 60 min de exposição. Para o PEBD, o ângulo foi de 99,42° para 77,68° em 60 min de exposição, não apresentando variação expressiva entre 60 min e 120 min. A Figura 1 mostra a superfície dos *pellets* antes e após o tratamento com radiação UV, obtidas por MEV. É perceptível as mudanças físicas

induzidas por radiação UV com a geração de ranhuras na superfície de ambos os microplásticos estudados.

Figura 1. Imagens MEV do PEAD a) sem tratamento b) exposto por 60 min c) exposto por 120 min e PEBD d) sem



tratamento e) exposto por 60 min f) exposto por 120 min

A análise de EDXRF indicou a complexação de cálcio, manganês e prata na superfície do PEAD, já na superfície do PEBD os mesmos metais foram complexados, com a adição de cobre e bário.

Conclusões

Conclui-se que a modificação superficial altera o caráter hidrofóbico dos microplásticos e assim, torna a superfície mais adesiva e com maior chance de complexar metais e assim removê-los de meios aquosos.

Agradecimentos

Agradecimentos à CAPES, FURG e CEME-SUL.

Referências e notas

- (1) Zhao, G., Huang, X., Tang, Z., Huang, Q., Niu, F., Wang, X. *Polymer Chemistry*, 9 (26), 3562-3582, **2018**.
- (2) Das, L., Poutsma, J. C., Kelley, M. J. *High Performance Polymers*, 32(7), 761-774, **2020**.
- (3) Mao, R., Lang, M., Yu, X., Wu, R., Yang, X., Guo, X. *Journal of Hazardous Materials*, 393, 122515, **2020**.

Complexo polieletrólítico carregado com ftalocianina de zinco (II) direcionado com biotina como alternativa para terapia fotodinâmica

Renata Dalcanale Araujo¹ (IC), Patrícia Sangaletti¹ (PG), Alfeu Zanotto-Filho² (PQ), Adriana Passarella Gerola¹ (PQ)*

*adriana.gerola@ufsc.br

¹ Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil.

² Departamento de Microbiologia, Imunologia e Parasitologia, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil.

Palavras Chave: Terapia Fotodinâmica, Fotoquímica, Sistema de entrega de fármacos, Complexo polieletrólítico, Ftalocianina.

Introdução

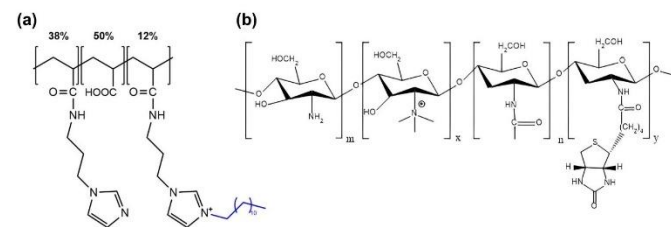
A terapia fotodinâmica (TFD) é um método alternativo para o tratamento de câncer (CA)¹, a qual se baseia na indução de morte celular causada por espécies reativas de oxigênio (EROs), que são produzidas após ativação do fotossensibilizador (FS), através da absorção de luz de um comprimento de onda específico. Em geral, os FS são moléculas hidrofóbicas, pouco solúveis e inativas em TFD em sua forma livre no organismo, havendo a necessidade de seu encapsulamento em sistemas de entrega de fármacos². Estes sistemas, quando planejados para possuir tamanho final não superior a 300 nm, podem acumular-se preferencialmente em tumores sólidos devido ao efeito de permeabilidade e retenção aumentada, tanto por mecanismos passivos – já que os tumores são irrigados por vasos sanguíneos fenestrados, que facilitam o extravasamento de nanomateriais em seus interior, quanto por mecanismos ativos, uma vez que as células de câncer apresentam superexpressão de receptores (de biotina, por exemplo) não observada em células saudáveis. Dessa maneira, realizou-se a síntese e caracterização físico-química de um sistema de entrega nanoestruturado, baseado na formação de um complexo polieletrólítico (CPE) composto por dois polímeros: (i) o PALm-12: poliácido acrílico funcionalizado com 1-(3-aminopropil)-imidazol, alquilado com 1-bromododecano; e (ii) a Bio-TMC: N,N,N-trimetilquitosana, funcionalizada com biotina. O CPE foi destinado ao encapsulamento do FS ftalocianina de zinco (ZnPc).

Resultados e discussão

Os polímeros sintetizados são representados na Figura 1: (a) PALm-12 e (b) Bio-TMC. Investigações de ¹H RMN confirmaram a presença de biotina na estrutura polimérica da TMC. O CPE PALm-12-ZnPc-Bio-TMC apresentou perfil de absorção UV-Vis com máximos de absorção característicos da ZnPc, em 615 e 674 nm. As medições de espalhamento dinâmico de luz (DLS) indicaram tamanho hidrodinâmico médio do CPE de

aproximadamente 260 nm e potencial Zeta de +29,2 mV. A combinação do pequeno tamanho e de biotina torna o sistema um bom candidato a beneficiar-se de acúmulos passivo e ativo nos tecidos tumorais em futuras aplicações *in vivo*.

Figura 1: Estrutura dos polímeros (a) PALm-12 e (b) Bio-TMC.



O PEC preparado mostrou-se eficiente na produção de EROs, como o oxigênio singlete (¹O₂). Resultados preliminares de testes *in vitro* com células de melanoma murino B16F10 demonstraram que, em baixas concentrações (1 μM), o sistema é capaz de causar citotoxicidade na presença de luz, sendo inativo no escuro.

Conclusões

O trabalho evidencia o potencial do sistema PALm-12-ZnPc-Bio-TMC em TFD. Estudos adicionais *in vitro* e *in vivo* compõe as futuras etapas deste trabalho.

Agradecimentos

À UFSC, CNPq, CAPES, INCT-Catálise e FAPESC

Referências e notas

- (1) Lee, C.-N., Hsu, R., Chen, H. & Wong, T.-W. Daylight Photodynamic Therapy: An Update. *Molecules* **25**, 5195 (2020).
- (2) Wu, D. *et al.* Chitosan-based Colloidal Polyelectrolyte Complexes for Drug Delivery: A Review. *Chitosan-based Colloidal Polyelectrolyte Complex for Drug Delivery: A Review* 14 (2020).

Investigação da interação entre novos derivados de 2,3-dialcoxifenazina e B-DNA via docking molecular

Magali Portela Moreira¹ (IC)*, Tiago Espinosa de Oliveira¹ (PQ)

*magali.moreira@ufcspa.edu.br

Grupo de Pesquisa em NanoBio Interfaces, Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre - RS - Brasil.

Palavras-Chave: Docking, 2,3-dialcoxifenazina, intercalação, sulco.

Introdução

A fenazina e seus derivados (em especial os derivados 2,3-dialcoxilados), são uma promissora linha de pesquisa com diversos compostos relatados recentemente na literatura¹. Estes compostos exibem potencial atividade antitumoral e, por isso, também desempenham um papel fundamental na pesquisa de novos medicamentos².

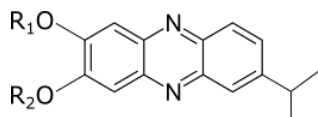


Figura 1. Estrutura dos derivados de 2,3-dialcoxifenazina, onde R₁ ou R₂ = -(CH₂)_{n-1}CH₃; (n = 1 ou 7).

O uso de simulações computacionais de docking molecular, possibilita a interação de entre ligante e um alvo macromolecular (e.g. proteínas e ácidos nucleicos) e classificar a potencial complementariedade entre eles. O Programa de docking é composto por um algoritmo, onde busca possíveis conformações e orientações do ligante na macromolécula, classificando os resultados obtidos pelo algoritmo e fornece um ranking dos pontos. Desta forma, é possível prever os modos de ligação mais favoráveis entre o ligante e a macromolécula e também a atividade biológica destes ligantes³.

O estudo foi realizado em três etapas: 1º) Desenho dos derivados de 2,3-dialcoxifenazina utilizando o programa WebMo; 2º) Otimização geométrica das moléculas com o programa REDServer, utilizando o método HF com uma base 6-31G⁴; 3º) Docking molecular utilizando o programa AutoDock-GPU⁵.

Resultados e discussão

Os resultados das simulações via docking que analisam a estabilidade do B-DNA com moléculas derivadas de 2,3-dialcoxifenazina, demonstram que os derivados de grupos R mais extensos e flexíveis apresentam interações com menor energia livre (mais estáveis) no sulco do B-DNA. Em contrapartida, os derivados com grupos R menores possuem maior preferência por

ligações tipo intercalação com o B-DNA, entretanto, esta interação é menos estável, conforme os resultados apresentados na **Tabela 1**.

Tabela 1. Resultados Docking molecular.

Molécula	Interação	%	Energia livre
M1.a	Intercalação	91	-5,53
	Sulco	9	-5,23
M1.b	Intercalação	11	-7,11
	Sulco	89	-7,70

^a **M1.a** (R₁ = R₂ = -CH₃); **M1.b** (R₁ = R₂ = -(CH₂)₆CH₃)

Conclusões

As simulações de *docking* corroboram com a hipótese de que a adição de grupos R assimétricos a 2,3-dialcoxifenazina interferem fortemente na estabilidade da ligação da molécula ao B-DNA.

Agradecimentos

Esse trabalho usou recursos do "Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho em São Paulo" (CENAPAD-SP). Gostaríamos de agradecer ao CNPq, FAPERGS e UFCSPA pelo apoio financeiro.

Referências e notas

- (1) Tetrahedron Letters, v. 56, n. 21, p. 695-2698 2015.
- (2) The Journal of Organic Chemistry, v. 88, n. 3, p. 1339-1351, 2023.
- (3) Journal of Molecular Inf. and Modeling, v. 49, p. 1925-1935, 2009.
- (4) Nucleic Acid Research v. 39, p. W511-W517, 2011.
- (5) Journal of Chemical Theory and Computation, v. 17, n. 2, p. 1060-1073, 2021.

Adsorção de produtos farmacêuticos e de cuidados pessoais (PPCPs) da água utilizando *Luffa cylindrica* hidrofobicamente modificada

Juliê Silveira da Costa (PG)^{1*}, Débora R. Soares dos Santos (IC)¹, André Ricardo Fajardo (PQ).¹

(*) ju_scosta@yahoo.com

¹ Laboratório de Tecnologia e Desenvolvimento de Compósitos e Materiais Poliméricos (LaCoPol), Universidade Federal de Pelotas (UFPel), Campus Capão do Leão s/n, 96010-900, Pelotas-RS, Brasil.

Palavras-Chave: Adsorção, esponja vegetal, ácido graxo, tratamento de água.

Introdução

Os produtos farmacêuticos e de cuidados pessoais (PPCPs) apresentam características físico-químicas, como uma alta hidrofobicidade, que dificultam a remoção deles por processos convencionais de tratamento de água. Dessa forma, diversas técnicas vêm sendo aplicadas como tratamento alternativo para remoção desses contaminantes. Entre as técnicas destaca-se a adsorção que é um processo, de fácil operação, baixo custo e com uma alta capacidade de remoção. O bom desempenho do processo de adsorção é totalmente dependente do adsorvente utilizado, que deve ter características semelhantes do contaminante a ser removido. No presente trabalho se utilizou a *Luffa cylindrica* (LF) que é um material lignocelulósico, abundante na natureza e que apresenta uma estrutura tridimensional, como um potencial adsorvente para PPCPs. Visando modificar a característica hidrofílica da LF, uma reação de esterificação foi realizada na superfície do material, utilizando o ácido esteárico (SAC). Este ácido graxo é empregado na modificação da superfície de diferentes materiais pois reduz significativamente a energia superficial da superfície e aumenta a hidrofobicidade do material. A fim de confirmar a reação de esterificação realizou-se a espectroscopia de infravermelho com transformada de Fourier (FTIR) antes e depois da reação. Ainda, acredita-se que a característica hidrofóbica na LF modificada possibilite a esse material uma maior capacidade de adsorver PPCPs do meio aquoso.

Resultados e discussão

Na Figura 1, é possível observar os espectros de FTIR obtidos para LF-NaOH e LF-NaOH/SAC. Observa-se uma diminuição na intensidade da banda em 3431 cm⁻¹ que é atribuída ao estiramento das ligações O-H dos grupos hidroxila presentes na LF. Por outro lado, um aumento é observado na intensidade das bandas em 2925 e 2855 cm⁻¹, que é causado pela contribuição do

alongamento C-H assimétrico e simétrico dos grupos CH₂ do SAC. Observa-se também o aparecimento de duas novas bandas; a primeira em 1691 cm⁻¹, que corresponde à vibração de grupos éster carbonila, e a segunda em 720 cm⁻¹ que corresponde as vibrações de grupo CH₂ de compostos que contêm cadeias de carbono com mais de quatro grupos CH₂. O aparecimento dessas bandas comprova a efetividade da reação de esterificação.

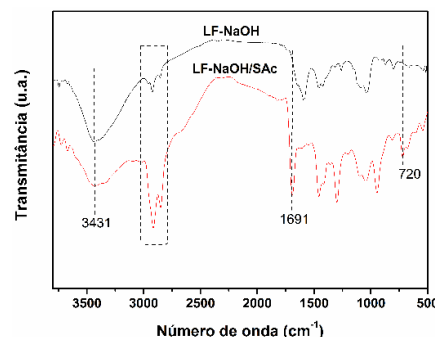


Figura 1. Espectros de FTIR obtidos para LF-NaOH e LF-NaOH/SAC.

Conclusões

Concluiu-se através das análises de FTIR que a reação de esterificação nas fibras de LF ocorreu de forma eficiente. Outras análises ainda serão realizadas (como ângulo de contato, análise elementar, TGA e MEV).

Agradecimentos

Ao apoio financeiro das agências de fomento (CNPq e CAPES) e à comissão organizadora da 29ª SBQSul.

Referências

- (1) Al-shirawi, M., Karimi, M., Al-maamari, R.S. *J. Pet. Sci. Eng.* **2021**, 203, 108.
- (2) Zeng, H., Wang, P., Liang, L., Hu, H., Peng, Y., Li, X., Liu, C. *J. Environ. Chem. Eng.* **2022**, 10, 106.

Sonda fluorossolvatocrômica derivada do núcleo 2,1,3-benzotiadiazol

Samara de Quadros (PG), Gleiston Gonçalves Dias (PG) e Vanderlei Gageiro Machado (PQ)*

*vanderlei.machado@ufsc.br

Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC, Brasil, Florianópolis / SC.

Palavras Chaves: Fluorossolvatocromismo, 2,1,3-benzotiadiazol, polaridade do solvente, sonda solvatocrômica

Introdução

Uma característica fotofísica importante de alguns compostos é a de exibirem solvatocromismo e o fluorossolvatocromismo.¹ Nesses casos, com uma mudança na polaridade do solvente há um deslocamento na posição e/ou intensidade na banda de absorção (e/ou de emissão) de maior comprimento de onda na região visível do espectro eletromagnético.^{2,3} A complexidade das interações soluto-solvente, aliada às potenciais aplicações que esses compostos apresentam têm levado à busca de novas famílias de sondas moleculares que exibem essas características. Neste trabalho, propôs-se o uso do composto **1** (Figura 1 A), que apresenta em sua estrutura molecular o núcleo 2,1,3-benzotiadiazol (BTD), como sonda para o estudo da polaridade de solvente orgânicos puros.

Resultados e Discussão

O composto **1** emite fluorescência em solventes orgânicos puros de diversas cores, tais como, amarela (tolueno), laranja (éter etílico) e verde (*n*-hexano). Nota-se ainda a ausência da emissão em etanol (Figura 1B).

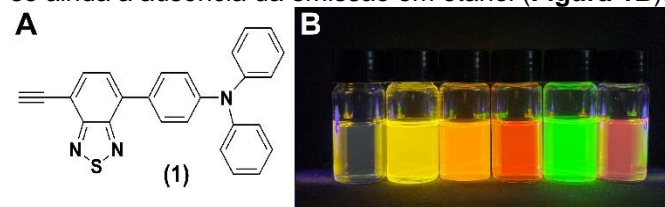


Figura 1. Fórmula estrutural do composto **1** (A) e aspecto visual sob excitação de luz UV ($\lambda = 365\text{nm}$) $c = 2,0 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$. Solventes: etanol, tolueno, éter etílico, triclorometano, *n*-hexano e acetona (B).

A **Figura 2** (A) mostra espectros de emissão para **1** em alguns solventes. Os comprimentos de onda de emissão máxima (λ_{max}^{em}) foram usados para calcular os valores das energias de transição molar (E_T) do corante em cada solvente estudado. Os valores de E_T calculados foram empregados para a realização do gráfico de comparação entre $E_T(30)$ e E_T dos compostos em kcal mol⁻¹ (Figura 2 (B)). A sonda **1** não é solúvel em água pura, mas é solúvel em uma mistura de 16,7% de etanol e 83,3% de água. Curiosamente, não ocorre emissão em etanol, mas na mistura de etanol e água a sonda emite fluorescência de cor laranja.

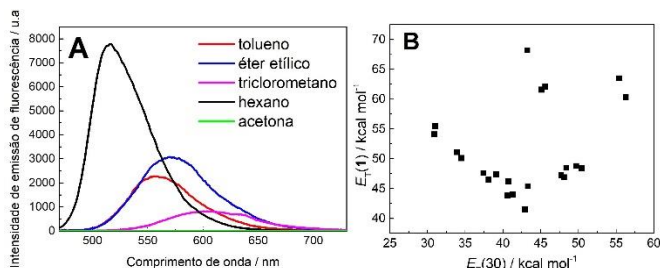


Figura 2. Influência do solvente no espectro de emissão de **1** $c = 3,0 \times 10^{-6} \text{ mol L}^{-1}$ $\lambda_{exc} = 470 \text{ nm}$ (A). Gráfico de E_T do composto **1** em função de $E_T(30)$ (B).

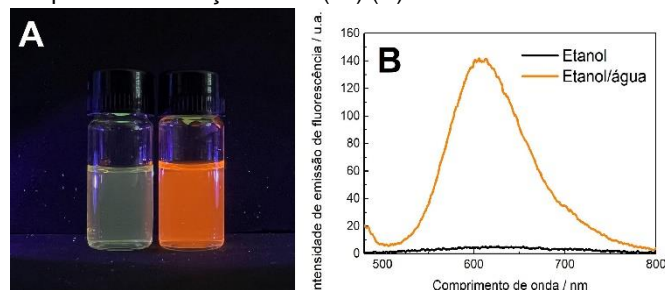


Figura 3. (A). Aspecto visual de **1** em etanol puro e na mistura de etanol com água sob excitação de luz UV ($\lambda = 365\text{nm}$) $c = 2,0 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$. (B) Espectros de emissão de fluorescência de **1** $c = 3,0 \times 10^{-6} \text{ mol L}^{-1}$.

Conclusões

O composto **1** exibe fluorossolvatocromismo.² Ocorre um aumento no valor da E_T com o aumento da polaridade do solvente e o λ_{max}^{em} sofre um deslocamento hipsocrômico. A falta de fluorescência de **1** em etanol puro e a emissão na mistura etanol/água sugerem que a sonda pode atuar na avaliação de misturas binárias e na detecção de água em etanol.

Agradecimentos

Ao CNPq e à CAPES pelo financiamento.

Referências e notas

- (1) Reichardt, C.; Welton, T. Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry, Wiley-VHC. 2011, 4a. edição.
- (2) Reichardt, C. *Chem. Rev.* **1994**, 94, 2319.
- (3) dos Santos, M.C.; et al. *J. Mol. Liq.* **2023**, 386, 122476.

Síntese, autodopagem e deposição de cobre em filmes de TiO₂NT

Leoncio de Mello¹ (IC), Prof^a Dra Mariana de Souza Sikora² (PQ).

¹ leonciomello@alunos.utfpr.edu.br ² marianasikora@professores.utfpr.edu.br.

Palavras Chave: dióxido de titânio nanotubular, eletrodeposição, sensores eletroquímicos.

Introdução

Sensores eletroquímicos que exploram a relação entre a concentração de substâncias e os sinais elétricos possuem um manuseio mais simples e são mais viáveis economicamente do que as técnicas instrumentais clássicas. Por esse motivo, este trabalho se concentra na síntese e caracterização eletroquímica de filmes de TiO_{2-x}NT/Cu⁰, para a criação de um sensor capaz de detectar e quantificar glifosato.

Resultados e discussão

Os filmes foram sintetizados por anodização potenciostática em meio de solução organo-aquosa contendo NH₄F 0,75% m/v, SBF 0,5% v/v e H₂O 9,5% v/v em etilenoglicol. A autodopagem, onde os íons Ti⁴⁺ reduziram para Ti³⁺ aplicando um potencial de -1,984 V. Posteriormente, na mesma configuração, houve a eletrodeposição de cobre com a técnica de pulso, seguindo a metodologia de ZHANG, J. et al(1), com modificações. Por fim, foram realizadas as voltametrias cíclicas variando à velocidade de varredura.

Na Figura 1 é mostrado em (a) o gráfico da curva de anodização dos filmes. Em (b) apresenta-se a curva de cronoamperometria obtida durante etapa de eletrodeposição. Após a eletrodeposição é possível verificar a olho nu a mudança de coloração do filme de cinza escuro (c) para o vermelho característico do cobre metálico (d).

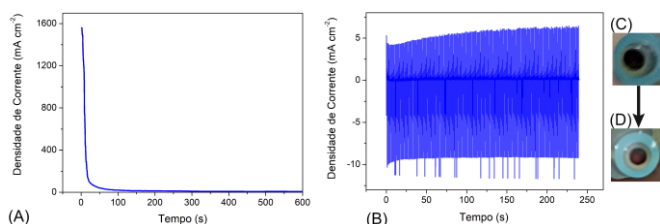


Figura 1. (a) Curva de anodização. (b) Curva de cronoamperometria. (c) Filme antes da deposição de cobre. (d) Filme após a deposição de cobre.

A caracterização eletroquímica ocorreu realizando cinco ciclos de varredura, onde, como visualizado na Figura 2(a), o cobre presente no eletrodo é oxidado, indo de Cu⁰ para Cu²⁺. A oxidação gera um pico no primeiro ciclo voltamétrico, onde

ocorre sua dissolução para o meio. Durante o estudo da influência da taxa de varredura, notou-se que à medida que esta aumenta, os valores de densidade de corrente referente ao pico de oxidação do cobre diminuem. Uma possível explicação é que a transferência de carga à altas velocidades de varredura seja suprimida pela elevada resistência do TiO₂. A alta resistência na interface óxido-metal, dificulta o processo de oxidação do Cu⁰, o que é visualizado na Figura 2(b) como um decréscimo na densidade de corrente em função do aumento da taxa.

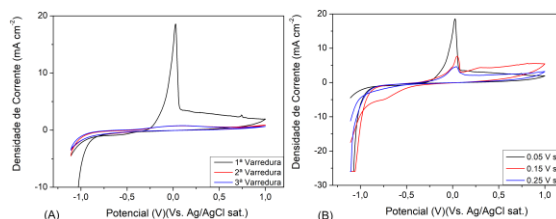


Figura 2. Voltametria cíclica do filme de TiO_{2-x}NT/Cu⁰.

Conclusões

Neste trabalho, realizou-se a síntese e caracterização eletroquímica do eletrodo TiO_{2-x}NT/Cu⁰. Observou-se que a corrente de pico de oxidação do cobre é inversamente proporcional à taxa de varredura. Em 0,05 V s⁻¹ o sinal do cobre apresentou maior valor de densidade de corrente. Isso representa um resultado promissor para a detecção de glifosato, uma vez que a detecção deste composto em eletrodos do tipo TiO_{2-x}NT/Cu⁰ ocorre por inibição, portanto maiores correntes de pico ampliam o limite de detecção do sensor.

Agradecimentos

Agradecemos a Fundação Araucária pela bolsa de Iniciação Científica.

Referências e notas

- (1) ZHANG, J. et al. Highly efficient Ti³⁺ self-doped TiO₂ co-modified with carbon dots and palladium nanocomposites for disinfection of bacterial and fungi. *Journal of Hazardous Materials*, v. 413, p. 125318–125318, 2021.

Modelagem de membranas em presença de anti-inflamatórios não esteroidais.

Camila Steffani Caovilla¹(IC)*, Tiago Espinosa de Oliveira¹(PQ)

camila.caovilla@ufcspa.edu.br

¹ Grupo de Pesquisa em NanoBio Interfaces, Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre - RS - Brasil

Palavras Chave: biomembranas, lipídios, anti-inflamatórios não esteroides

Introdução

As interações entre fármacos e biomembranas em nível microscópico desempenham um papel crucial no desenvolvimento de fármacos e na compreensão de como eles interagem com as células. As membranas, constituídas por bicamadas lipídicas, são a primeira barreira encontrada pelos fármacos ao entrar em uma célula, tornando suas propriedades essenciais para a integridade funcional dos sistemas biológicos.¹ Estudos recentes têm demonstrado que os anti-inflamatórios não esteroidais (AINEs), como aspirina (ASP) e ibuprofeno (IBU), não apenas inibem a síntese de prostaglandinas, mas também interagem com a membrana, afetando suas propriedades.^{2,3}

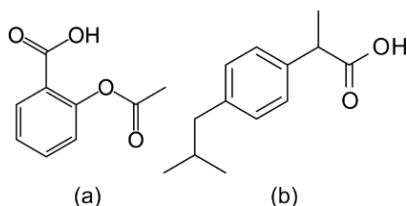


Figura 1. Fórmula estrutural dos AINEs, (a) ASP e (b) IBU.

O uso de simulações computacionais, como a dinâmica molecular (DM), permite uma investigação detalhada das interações em nível molecular, auxiliando no desenvolvimento de fármacos. Para isso, o presente trabalho apresenta novas simulações de DM para a elucidação das interações fármaco-membrana e os seus respectivos efeitos nas propriedades da membrana.

Os estudos de DM foram conduzidos utilizando o pacote GROMACS.⁴ Os parâmetros utilizados nas simulações *all-atom* para os lipídios e AINEs utilizados foram do campo de forças CHARMM. Os sistemas: (a) DMPC e (b) DMPC + IBU, foram submetidos a duas temperaturas diferentes (283 e 333 K), a fim de investigar o comportamento dessas estruturas em duas fases distintas (gel e fluida).

Resultados e discussão

Resultados preliminares das propriedades mecânicas da bicamada foram obtidos a partir das flutuações na área derivada do acoplamento semi-isotrópico do sistema. O módulo de elasticidade de alongamento isotérmico (K_A) de acordo com a relação:⁵

$$K_A = k_b T \frac{\langle A \rangle}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

Os resultados obtidos (Tabela 1) mostram que a presença de AINEs, como os ibuprofenos, reduzem o K_A . O efeito é mais pronunciado na fase gel (283 K).

Tabela 1. Módulo de elasticidade para a membrana de DMPC em presença ou não de IBU para as duas temperaturas.

T (K)	Sistema	K_A (mN/m) ^a	K_A (mN/m) ^b
283	DMPC	1425	1765
	DMPC + IBU	582	652
333	DMPC	200	292
	DMPC + IBU	165	116

^a Simulação; ^b Experimental ²

Conclusões

As simulações de DM, utilizando o campo de forças CHARMM combinado com o modelo de água TIP3P foram capazes de reproduzir os dados experimentais observados pela presença de AINEs em uma membrana modelo de DMPC.

Agradecimentos

Esse trabalho usou recursos do "Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho em São Paulo" (CENAPAD-SP). Gostaríamos de agradecer ao CNPq, FAPERGS e UFCSPA pelo apoio financeiro.

Referências e notas

- (1) Langmuir 37, 4468 (2021).
- (2) Phys. Chem. Chem. Phys. 21, 20211-20218 (2019)
- (3) Biomembranas 1862, 183100 (2020).
- (4) <https://gromacs.org/>
- (5) Phys. Rev. Res. 2, 013075 (2020).

Modelagem molecular de nanocompósitos poliméricos aplicados a manufatura aditiva

Gabriel Cattani Ghisio (IC)^{1*}, Tiago Espinosa de Oliveira (PG)¹

¹ Grupo de Pesquisa em NanoBio Interfaces, Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre - RS - Brasil

* gabriel.ghisio@ufcspa.edu.br

Palavras Chave: Nanocompósitos, Polímeros, Nanopartículas.

Introdução

Com os avanços recentes na tecnologia dos nanocompósitos e na manufatura aditiva (impressão 3D), torna-se necessário investigar as propriedades intrínsecas desses materiais, que apresentam um grande potencial de aplicação nas ciências da saúde. (1)

Na área da impressão 3D, os nanocompósitos poliméricos têm ganhado destaque devido às limitações dos polímeros convencionais, o que abre espaço para o estudo de materiais que possam aprimorar o produto final. (2) Nesse contexto, as simulações como a dinâmica molecular (DM) desempenham um papel fundamental no entendimento das propriedades desses materiais. (3) A proposta busca a elucidação de maneira sistemática, tanto em uma perspectiva macroscópica quanto microscópica, o impacto dessa adição, podendo contribuir para o desenvolvimento de novos materiais com aplicação em diversas áreas da saúde.

No presente trabalho são apresentados resultados iniciais da validação dos parâmetros de simulação para descrever o comportamento do poli(metil-metacrilato) (PMMA), um dos principais polímeros utilizados na impressão 3D de materiais com potencial aplicação nas ciências da saúde.

Os estudos de DM foram conduzidos utilizando o pacote GROMACS. (4) Os parâmetros utilizados nas simulações *coarse-grained* (CG) para PMMA utilizados foram do campo de forças MARTINI3. Os sistemas: (a) PMMA e (b) PMMA + NF (nano preenchedor), contendo 200 cadeias (50 monômeros por cadeia) foram submetidos a temperatura de 600K para garantir que o polímero estivesse fundido.

Resultados e discussão

Resultados preliminares da mobilidade das cadeias de PMMA, analisando o deslocamento quadrático médio (MSD), mostram que a presença de uma NF que apresente uma maior afinidade pelo polímero reduz a mobilidade das mesmas.

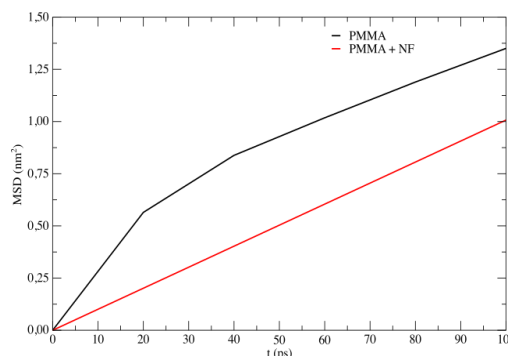


Figura 1. MSD em função do t para as moléculas de PMMA.

O coeficiente de difusão pode ser calculado aplicando a relação de Einstein:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle ||r_i(t) - r_i(0)||^2 \rangle = 6Dt$$

No sistema sem e com NF os coeficientes de difusão são $0,42 \times 10^{-5}$ e $0,38 \times 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$, respectivamente.

Conclusões

A presença de um preenchedor com característica de interações atrativa com o polímero alterou consideravelmente a mobilidade das cadeias, fator esse crucial para a impressão 3D.

Agradecimentos

Esse trabalho usou recursos do "Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho em São Paulo" (CENAPAD-SP). Gostaríamos de agradecer ao CNPq, FAPERGS e UFCSPA pelo apoio financeiro.

Referências e notas

- (1) International Journal of Pharmaceutics, vol. 620, p. 121750, 2022.
- (2) International Journal of Pharmaceutics, vol. 628, p. 122293, 2022.
- (3) Advanced Materials, vol. 33, no. 24, p. 2008635, 2021.
- (4) <https://gromacs.org/>

Nanocompósitos de óxido de grafeno reduzido e nanopartículas de níquel: adaptando o tamanho das nanopartículas para melhores sensores eletroquímicos

Anna E. Silva¹, Lízia A.X. Bulin², Jean C. Bassani², Daniela Z. Mezalira² e Eduardo G.C. Neiva^{1*}
eneiva@furb.br

1-Departamento de Química, Universidade Regional de Blumenau (FURB), CEP 89012900, Blumenau, SC, Brasil.

2-Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), CEP 88040900, Florianópolis, SC, Brasil.

Palavras Chave: óxido de grafeno, óxido de grafeno reduzido, filmes finos, sensor eletroquímico, cronoamperometria, glicose.

Introdução

A detecção de glicose merece atenção, tanto para o diagnóstico clínico quanto para o monitoramento e prevenção de doenças como diabetes. Os nanomateriais têm apresentado excelente desempenho para sensores eletroquímicos aplicados na detecção de diversos analitos. A utilização de materiais eletrocatalíticos nesta escala de tamanho proporciona vantagens como maior área superficial, superfícies mais reativas, melhor transporte de massa, menores potenciais de detecção, etc, que contribuem para maior sensibilidade e seletividade. Nanopartículas de Ni (NPs de Ni) tem grande destaque na construção de sensores eletroquímicos aplicados em meio alcalino para diferentes analitos como glicose, através da espécie catalítica de NiOOH gerada em meio alcalino.⁽¹⁾ Nesse trabalho foi avaliada a proporção de agente redutor na síntese de NPs de Ni com óxido de grafeno reduzido (rGO) pelo método poliol modificado, bem como a presença de polivinilpirrolidona (PVP).

Resultados e discussão

Nessa rota sintética, o NaBH₄ atuou como agente redutor dos íons Ni²⁺, o qual levou a formação de NPs de Ni com estrutura cristalina cúbica de face centrada, segundo os dados de difração de raios X. Foi verificado pelas imagens de microscopia eletrônica de varredura (MEV) e de transmissão (MET), que quanto maior a proporção de agente redutor, menor o tamanho de partícula, como esperado, estando o etileno glicol, usado como solvente, atuando como passivante. Quanto utilizado PVP como passivante extra, não houve mudança significativa de tamanho. Os nanocompósitos de NPs de Ni com rGO foram dispersos em água utilizando ultrassom de banho e empregados na modificação de eletrodos de ITO. As caracterizações eletroquímicas em meio de NaOH 1 mol L⁻¹ identificaram a conversão do Ni em Ni(OH)₂/NiOOH. As amostras foram avaliadas como sensores para detecção de

glicose utilizando cronoamperometria aplicando-se o potencial de pico anódico do 50º ciclo voltamétrico para cada amostra. Todos as amostras apresentaram comportamento eletrocatalítico para detecção do analito, sendo que a amostra com menor tamanho de NPs de Ni com PVP apresentou a maior sensibilidade, provavelmente devido à melhor distribuição das NPs sobre as folhas de rGO. Para essa amostra, foi otimizado o potencial de cronoamperometria, onde o potencial subsequente ao potencial de pico gerou a melhor sensibilidade. Nessas condições, essa amostra foi utilizada para detecção de glicose na faixa de 1 a 1000 µmol L⁻¹, gerando um limite de detecção de 0,29 ± 0,02 µmol L⁻¹. Esse nanocompósito apresentou ótima reprodutibilidade (n=7), já quanto a repetibilidade (n=4), foi verificada uma contínua diminuição da sensibilidade, provavelmente decorrente de lixiviação do eletrodo. Além de glicose, esse eletrodo também apresentou resposta para ácido úrico e ascórbico, não sendo sensível a NaCl, KCl, ureia e frutose.

Conclusões

Foi possível sintetizar com sucesso nanocompósitos de NPs de Ni com rGO pelo método poliol modificado e através da proporção de agente redutor, controlar o tamanho de partícula. Todos os nanocompósitos foram sensíveis ao glicerol em meio alcalino, sendo que as NPs com menor tamanho e com passivante extra apresentaram o melhor comportamento eletrocatalítico.

Agradecimentos

FAPESC, FURB, INCT-Nanocarbono e INCT-Nanovida.

Referências e notas

(1) Silva, A. E.; de Souza, V. H. R.; Neiva, E. G. C., Appl. Surf. Sci. 2023, 622, 156967.

Estudo da Eficiência e Recuperação dos Fotocatalisadores TiO₂ e Nb₂O₅ na Degradação do Corante Alaranjado de Metila

Brenda Koch^{1*} (IC), Caroline Maroli¹ (PG), Cristiane Pilissão² (PQ), Daniela Zambelli Mezalira¹ (PQ).

*brenda.koch@grad.ufsc.br

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), Florianópolis - SC.

²Departamento Acadêmico de Química e Biologia, Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), Curitiba - PR.

Palavras Chave: Fotocatálise, Óxido de nióbio, Óxido de titânio, Alaranjado de Metila.

Introdução

A fotocatalise heterogênea é um método promissor para a degradação de corantes, contaminantes de águas naturais provenientes do descarte impróprio de resíduos industriais.¹ Um dos desafios desse método é a separação eficaz do fotocatalisador do meio reacional, impedindo seu reaproveitamento e encarecendo o processo. Neste trabalho foram realizados estudos acerca da eficiência da degradação do alaranjado de metila usando Nb₂O₅ e TiO₂ em reações fotocatalíticas e avaliada a recuperação do fotocatalisador.

Resultados e discussão

Na **Figura 1** estão as imagens de microscopia eletrônica de transmissão (MET) para os fotocatalisadores.

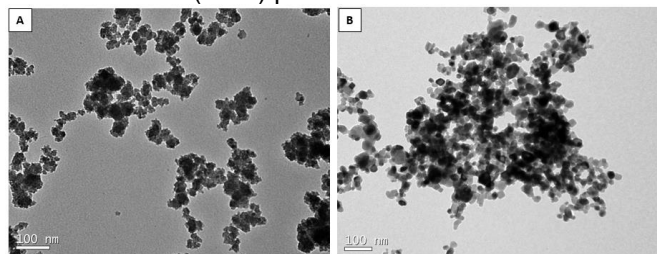


Figura 1. MET dos fotocatalisadores: a) Nb₂O₅ e b) TiO₂.

As micrografias obtidas mostram a presença de aglomerados de nanopartículas em ambos os materiais. A área superficial do TiO₂ é igual a 60 m² g⁻¹ e do Nb₂O₅ igual a 123 m² g⁻¹.

Os estudos de fotodegradação do alaranjado de metila, foram realizados utilizando 100 mL de uma solução aquosa do corante na concentração de 10 ppm. Foram utilizados 100 mg de catalisador, em meio ácido, neutro e básico, na presença de H₂O₂ 3% e com uma lanterna de LED de λ=393 nm como fonte de radiação. O sistema foi mantido em agitação e a reação foi acompanhada por 60 minutos.

A **Figura 2** apresenta os resultados em pH 3, onde a diminuição da absorvância no decorrer da reação indica a eficiência dos catalisadores frente a fotodegradação do corante nesse pH.

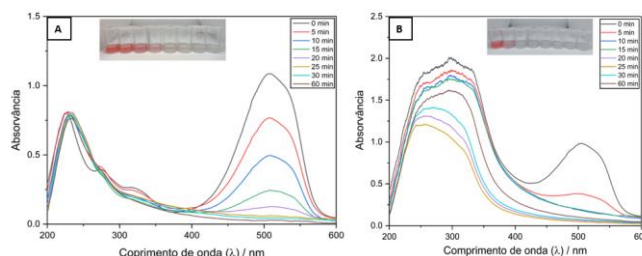


Figura 2. Espectro de absorção UV-vis da fotodegradação de AM na presença a) Nb₂O₅ e b) TiO₂.

Nenhum dos fotocatalisadores foi eficiente para a degradação do corante em pH básico. Em meio neutro, a fotodegradação ocorreu apenas com o TiO₂. Contudo, a alta dispersão do TiO₂ na solução dificultou a separação do material do meio reacional prejudicando a recuperação e uma possível reutilização do catalisador.

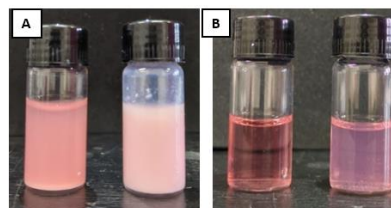


Figura 3. Imagens da dispersão, antes e após a centrifugação, do Nb₂O₅ (esquerda) e TiO₂ (direita).

Conclusões

Embora os resultados indicaram que o TiO₂ foi mais eficiente para degradação do alaranjado de metila em pH neutro e ambos catalisadores degradaram o corante em pH ácido, o Nb₂O₅ apresentou vantagem devido sua melhor separação proporcionar sua recuperação.

Agradecimentos

Ao CNPq, UFSC, UTFPR, LCME-UFSC e LOOSA.

Referencias e notas

Akerdi, A. G.; Bahrami, S. H. Environm. Chem. Eng. **2019**, 7, 5.

Luffa cylindrica graftizada com quitosana como potencial adsorvente para remoção de compostos aniônicos da água

Débora R. Soares dos Santos (IC)^{1*}, Pâmela Macchion (IC)¹, Juliê S. da Costa (PG)¹, André R. Fajardo (PQ)¹

(*) deborarosane15@gmail.com

¹ Laboratório de Tecnologia e Desenvolvimento de Compósitos e Materiais Poliméricos (LaCoPol), Universidade Federal de Pelotas (UFPEL), Campus Capão do Leão s/n, 96010-900, Pelotas-RS, Brasil.

Palavras Chave: Adsorção, esponja, contaminantes emergentes, tratamento de água.

Introdução

A combinação de materiais celulósicos com a quitosana (QT) tem sido amplamente utilizada na formulação de adsorventes, pois a presença dos grupos hidroxila permite que ligações de hidrogênio entre o adsorvente e o adsorvato sejam feitas e a presença dos grupos amina permite que interações eletrostáticas ocorram. Tendo em vista isto, no presente trabalho se utilizou a *Luffa cylindrica* (LF) como fonte de celulose e a QT, para desenvolver um adsorvente capaz de remover espécies carregadas dos corpos hídricos. A LF é um material lignocelulósico composto majoritariamente por celulose. A estrutura deste material permite com que um adsorvente seja feito por modificações nas suas fibras. Logo nesse sentido se utilizou a QT que é um polímero que possui grupos amina que favorecem o processo de adsorção. A modificação das fibras da LF foi feita utilizando o glutaraldeído (Glut) como agente reticulante entre a LF e a QT. A fim de confirmar o processo de modificação das fibras de LF, algumas análises de caracterização foram realizadas no material resultante (LF-g-QT). Ainda, acredita-se que a presença da QT resulte em um material com capacidade de adsorver contaminantes aniônicos, como por exemplo os fluoretos, nitratos e sulfitos.

Resultados e discussão

Na Figura 1, é possível observar os espectros de FTIR obtidos para LF, QT e LF-g-QT. A banda alargada em 3438 cm^{-1} é atribuída ao estiramento das ligações O-H e N-H dos grupos hidroxila e amina presentes na LF e na quitosana, respectivamente. Já a banda em 2900 cm^{-1} esta associada ao estiramento das ligações C-H, dos grupos $-\text{CH}_x$ presentes no material. Além disso, a graftização do grupo amina da QT com o grupo aldeído do Glut pode ser confirmada pela presença de uma nova banda em 1637 cm^{-1} .

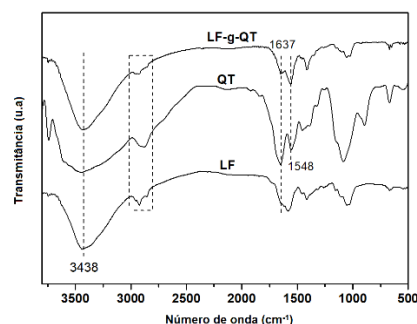


Figura 1. Espectros de FTIR obtidos para LF, QT e LF-g-QT.

Ainda, a análise elementar (Tabela 1) mostrou que após o processo de graftização o teor de N aumentou de $0,29\pm 0,01\%$ para $0,62\pm 0,08\%$, mostrando que se tem a presença da QT nas fibras da LF.

Tabela 1. Teor de C, H, N, S em LF e LF-g-QT.

Amostra	C (%)	H (%)	N (%)	S (%)
LF	$43,64\pm 0,37$	$6,61\pm 0,07$	$0,29\pm 0,01$	$0,82\pm 0,05$
LF-g-QT	$42,21\pm 0,30$	$6,78\pm 0,12$	$0,62\pm 0,08$	$0,81\pm 0,01$

Conclusões

Concluiu-se através das análises de FTIR e teor de CHNS que ocorreu a graftização da QT nas fibras de LF utilizando Glut como reticulante. Outras análises ainda serão realizadas (como TGA, MEV e pH_{pzc}).

Agradecimentos

Agradecimentos ao CNPq pela bolsa de iniciação científica concedida para a realização da pesquisa.

Referências e notas

- (1) Doustdar, F.; Olad, A.; Ghorbani, M. *Int. J. Biol. Macromol.* **2022**, 208, 912.
- (2) Poon, L.; Wilson, L. D.; Headley, J. V. *Carbohydr. Polym.* **2014**, 109, 92.
- (3) Kim, U.; Kimura, S.; Wada, M. *Carbohydr. Polym.* **2019**, 214, 294.

Modificação das propriedades eletrônicas do MoS₂ por funcionalização com líquido iônico

Lidiane da Silva Pluczinski¹(PG)*, Cláudio Radtke¹(PQ). lidipluc@hotmail.com

¹ Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Química, Departamento de Físico-Química, Programa de Pós-Graduação em Microeletrônica. Av. Bento Gonçalves, nº 9500, Agronomia, Porto Alegre – RS.

Palavras Chave: MoS₂, Líquido iônico, Funcionalização, Dopagem, DMT, 2D.

Introdução

As propriedades singulares dos dicalcogenetos de metais de transição (DMTs) em camadas bidimensionais (2D) têm atraído considerável atenção^{1,2,3}. Com *bandgaps* variando entre 0 a 2 eV, DMTs são compostos com estequiometria MX₂ (M = Mo ou W e X = S ou Se). A versatilidade desses compostos permite seu uso como materiais metálicos ou semicondutores^{2,3}. Além disso, DMTs em monocamada exibem um *gap* direto permitindo seu uso em dispositivos optoeletrônicos². Para aproveitar todas essas propriedades, e aprimorar algumas características, a funcionalização realizada por diferentes fontes é amplamente estudada².

O aumento ou redução da fotoluminescência (PL) estão intrinsecamente relacionados não apenas aos números das camadas do material, como também às moléculas funcionalizantes². Tendo conhecimento da importância da busca de novos materiais que supram a demanda por melhores tecnologias, nosso trabalho consiste em funcionalizar MoS₂ com um líquido iônico visando a modificar suas propriedades optoeletrônicas.

Resultados e discussão

O MoS₂ foi sintetizado por sulfurização de molibdato de sódio. Uma solução aquosa deste sal foi dispersa na superfície de um substrato de silício; e após a etapa de sulfurização, o MoS₂ foi obtido na maior parte da superfície da amostra, fig. 1. A funcionalização com o líquido iônico 1-Butil-3-hexafluorofosfato de metilimidazólio, diluído em diclorometano, foi realizada por deposição de gotas.



Figura 1. Imagem do MoS₂ obtida via microscopia óptica, zoom 100x.

Foram realizadas análises de XPS, Raman e PL nas amostras antes e após a funcionalização, fig. 2 e 3.

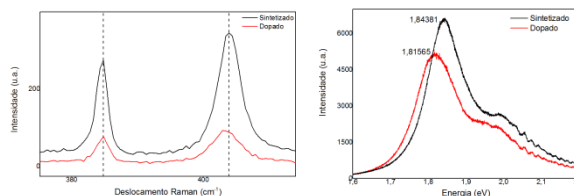


Figura 2. Espectro Raman (esquerda) e PL (direita) antes e depois da dopagem.

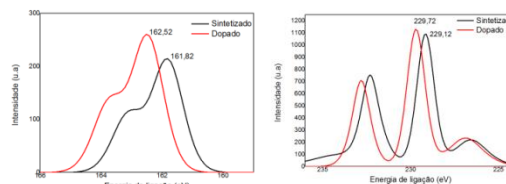


Figura 3. Espectro de XPS da região do S 2p (esquerda) e do Mo 3d (direita) antes e depois da dopagem.

Conclusões

Avaliando os resultados obtidos, houve a funcionalização do MoS₂, com modificação de suas propriedades eletrônicas resultando em uma dopagem do tipo N.

Agradecimentos

Nós gostaríamos de agradecer a PGMICRO - UFRGS, INCT INES, MCTIC/CNPq, CAPES, e FAPERGS.

Referências e notas

- (1) Liu, H., Gi, g., et al. *ACS Applied Materials Interfaces*. **2020**, 12, 13174–13181.
- (2) Mouri, S., Miyauchi, Y., et al. *Nano Letters*. **2013**, 13 (12), 5944–5948.
- (3) Zhang, S., et al. *Adv. Mater.* **2018**, 30, 1802991.

Preparação de filmes de PVA/Co₃O₄-TiO₂ por eletrofição para degradação de contaminantes emergentes

Felipe G. Kirchhoff¹ (IC)*, Gabriel N. Fraga¹ (PG), Douglas C. Dragunski¹ (PQ), Guilherme G. Bessegato² (PQ)

*fgkirchhoff@gmail.com

¹Universidade Estadual do Oeste do Paraná (Unioeste), Campus Toledo, Centro de Engenharias e Ciências e Exatas, Toledo/PR.

²Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), Campus Dois Vizinhos, Dois Vizinhos/PR.

Palavras Chave: Nanofibras Eletrofiadas, Radicais Sulfato, Processos Oxidativos Avançados, Fotocatálise.

Introdução

Os Contaminantes de Preocupação Emergente (CPEs) representam substâncias químicas que, embora ainda não regulamentadas, possuem potencial para causar impactos na saúde humana e no meio ambiente. A degradação/remoção dessas substâncias é necessária para assegurar a saúde humana e proteção do meio ambiente. Os Processos Oxidativos Avançados (POAs), baseados em espécies altamente reativas, como os radicais $\cdot\text{OH}$ e $\text{SO}_4^{\cdot-}$, têm se mostrado promissores nesse contexto. O desenvolvimento de POA que sejam viáveis é um desafio que precisa ser contornado. Neste trabalho, foram obtidas membranas poliméricas de PVA, um polímero barato e biodegradável, sendo incorporados TiO_2 e Co_3O_4 para a degradação do fármaco tetraciclina por meio da ativação do peroximonosulfato simultaneamente à fotocatálise.

Resultados e discussão

Por meio de Microscopia eletrônica de varredura pode-se observar as características morfológicas das fibras que se apresentaram-se homogêneas e lisas sem a presença de imperfeições ou beads, variando seu diâmetro de 92 à 111 nm. O diâmetro médio resulta do alto peso molecular do PVA ($104,5 \text{ g mol}^{-1}$) e seu alto grau de hidrólise (87%-89%) resultando em uma maior tensão superficial da solução qual implica em um aumento na tensão crítica para a ejeção do jato. Entretanto, o elevado peso molecular dificulta no relaxamento das cadeias poliméricas tornando a divisão e expansão dos jatos mais ineficientes. Os espectros de FTIR das membras eletrofiadas apresentaram uma banda em 3342 cm^{-1} associado ao alongamento vibracional dos grupos (O – H). Em 2940 e 2920 cm^{-1} as duas bandas representam a vibrações (C – H) dos grupos metileno (CH_2). Em 1714 cm^{-1} ocorrem vibrações de flexão (C = O). Em 1190 o estiramento (C – C) na região cristalina do polímero. Em 1090 cm^{-1} as bandas

de (C – O) e (O – H). Análises de resistência mecânica mostraram que o processo de reticulação provocado pela adição do ácido cítrico resulta no aumento da rigidez (módulo de elasticidade), e diminuição na flexibilidade (alongamento). A incorporação dos óxidos de cobalto e titânio acarretou uma melhora significativa nas propriedades mecânicas das fibras, tornando-as mais rígidas e flexíveis quando comparado com fibras de PVA reticuladas. Experimentos de degradação com o composto modelo Azul de Metileno via ativação do peroximonosulfato com a membrana PVA/Co₃O₄ apresentaram 90% de descoloração em 30 min, mas a alta adsorção do corante na membrana não permitiu vários ciclos de reuso com a mesma eficiência. Foram realizados testes de degradação com o antibiótico tetraciclina (TC) e foi possível obter 25% de degradação em 30 min. Ainda são necessários mais experimentos para confirmar a estabilidade e a capacidade de adsorção da TC na superfície do polímero além da otimização das condições de degradação. Futuros experimentos visam a ativação simultânea do PMS e da fotocatálise para melhorar a degradação de CPEs. Espera-se que este material possa produzir radicais $\cdot\text{OH}$ e $\text{SO}_4^{\cdot-}$ simultaneamente para uma degradação mais eficiente de contaminantes emergentes.

Conclusões

Estes resultados apontam para a eficácia das membranas PVA/Co₃O₄/TiO₂ na degradação de contaminantes emergentes, abrindo caminho para uma nova solução ambiental mais eficiente e sustentável baseado em um processo oxidativo avançado.

Agradecimentos

À Unioeste e ao CNPQ pela bolsa concedida e pelo projeto nº 428014/2018-6.

Referências

(1) G. N. Fraga et al., *Colloids Surf A Physicochem Eng Asp*, **674**, 2023.

Processos de fotodegradação do agrotóxico piraclostrobina e determinação da toxicidade aguda para o organismo-teste *Vibrio fischeri*

Daniela Cristina Horst Pereira Metz¹ (PG)*, Cristiane da Silva Barth¹ (PQ), Victor Rodrigues Alves¹ (PG), Andrey Martinez Rebelo² (PQ), Lizandra Maria Zimmermann¹ (PQ)

*dchpereira@furb.br; lmz@furb.br

¹Departamento de Química, Fundação Universidade Regional de Blumenau (FURB), Blumenau, SC, Brasil

²Empresa de Pesquisa Agropecuária e Extensão Rural de Santa Catarina (EPAGRI), Itajaí, SC, Brasil

Palavras Chave: Fotólise, Agrotóxico, Piraclostrobina, Ecotoxicidade, *Vibrio fischeri*.

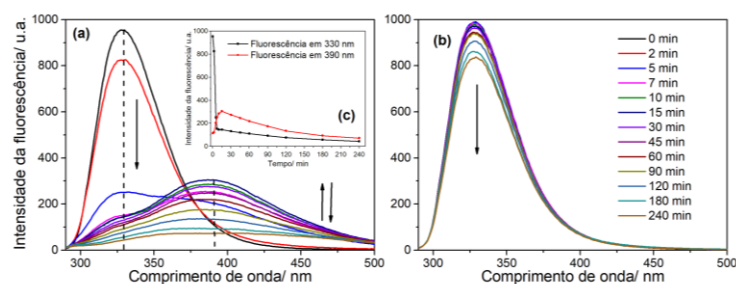
Introdução

O crescimento da população mundial tem elevado a demanda por alimentos e por processos agrícolas que apresentem um bom rendimento. Para tal finalidade, cerca de 4 milhões de toneladas de agrotóxicos são utilizados anualmente no mundo¹. O uso inadequado de agrotóxicos eficientes tem elevado a exposição do meio ambiente e dos seres humanos aos resíduos destas substâncias. Atualmente, a piraclostrobina é um dos poluentes mais frequentes nos ambientes aquáticos e muitos estudos já comprovaram a toxicidade deste agrotóxico para diferentes organismos vivos². Neste viés, os processos de fotodegradação emergem como uma técnica eficaz para a remediação de agrotóxicos. Diante disso, o objetivo deste trabalho consistiu em explorar diferentes fontes de radiação para desenvolver um método seguro, reprodutível e eficaz de fotodegradação do agrotóxico piraclostrobina.

Resultados e discussão

A fotodegradação da piraclostrobina foi investigada sob ação da luz ultravioleta (UV) (125 W) e fluorescente (105 W). A cinética da degradação foi acompanhada por fluorescência (fig 1), UV-Vis e HPLC/DAD. Os resultados obtidos sugerem que a piraclostrobina é degradada mais eficazmente sob ação da luz UV. Ensaios para a determinação da ecotoxicidade do agrotóxico piraclostrobina sobre a bactéria marinha luminescente *Vibrio fischeri* foram realizados. Os resultados encontrados estão expressos em termos de concentração efetiva (CE) da amostra que causou 50 % (CE₅₀) da inibição da luminescência e fator de toxicidade (FT), o qual indica o fator de diluição necessário (v/v) para que a amostra deixe de apresentar efeito tóxico significativo. Os valores de CE₅₀ e FT para a solução de piraclostrobina (20 mg L⁻¹), após 30 min de exposição, foram de 7,9 (mg L⁻¹) e 16, respectivamente.

Figura 1. Espectros de emissão de fluorescência para acompanhamento da fotodegradação da piraclostrobina (20



mg L⁻¹ ou 5,15×10⁻⁵ mol L⁻¹) em H₂O:MeOH (75:25 % v/v) a partir da excitação em 270 nm utilizando luz (a) UV e (b) fluorescente. (c) Gráfico que mostra a variação da intensidade da fluorescência durante o curso da reação sob luz UV.

Conclusões

Os ensaios conduzidos até o momento permitiram determinar o modelo mais eficiente de fotodegradação do agrotóxico piraclostrobina, além de conhecer a toxicidade aguda para o organismo-teste *Vibrio fischeri*. Todavia, estudos aprofundados para a investigação mecanística e determinação dos produtos gerados serão desenvolvidos a fim de se conhecer a eficiência da degradação e assegurar a não toxicidade dos fotoprodutos.

Agradecimentos

FURB, UNIEDU, Epagri.

Referências e notas

- (1) Mahdavi, V.; Gordan, H.; Ramezani, S.; Mousavi Khaneghah, A. *Environ. Sci. Pol. Res.* **2022**, 29, 55311.
- (2) Zeng, L. R.; Shi, L. H.; Meng, X. G.; Xu, J.; Jia, G. F.; Gui, T.; Hu, D. Y. *Journal of Environ. Sci. Health.* **2019**, 54, 317.

Poli(tereftalato de etileno) revestido com multicamadas de polieletrólitos antimicrobiais a base de gelatina/sulfato de condroitina incorporadas com líquidos iônicos

Paulo R. Souza (PQ)^{1,2*}; Bruno H. Vilsinski (PQ)³; Ariel C. de Oliveira (PQ)¹; Henri S. Schrekker (PQ)⁴; Eduardo Radovanovic (PQ)¹; Alessandro F. Martins (PQ)^{1,5,6}; Edvani C. Muniz (PQ)^{1,7}. srpsouza1@gmail.com

¹Departamento de Química, UEM; ²Departamento de Física, UFSM; ³Departamento de Química, UFJF; ⁴Instituto de Química, UFRGS;

⁵Departamento de Química, UTFPR- Apucarana; ⁶Chemistry and Biochemistry Department, University of Wisconsin-River Falls;

⁷Departamento de Química, UFPI

Palavras Chave: Biomacromoléculas, Polímeros, Líquidos iônicos, atividade antimicrobiana

Introdução

As multicamadas de polieletrólitos (MPEs) podem ser obtidas pela técnica Layer-by-Layer (LbL) as quais revestem substratos sólidos [1]. Nessa técnica, as MPEs são preparadas por adsorção/deposição de camadas alternadas policatiônicas e polianiônicas, ambas em solução [2]. Desta forma, o método LbL modifica a superfície química dos substratos sólidos, conferindo propriedades biológicas, incluindo antimicrobiana, citocompatibilidade, cicatrização de tecidos entre outras [3], isto é, os substratos assumem as propriedades dos polímeros que os revestem.

O revestimento das superfícies podem melhorar as características dos substratos, como por exemplo, o poli(tereftalato de etileno)-PET, que possui diversas aplicabilidade devido ao seu baixo custo, boa propriedade mecânica; como embalagem de alimentos, dispositivos médicos, ligamentos artificiais, isto é, apresentam aplicações em ambientes que não pode ter contato com microrganismos patogênicos.

Neste trabalho foi obtido o revestido de PET, utilizando a gelatina (GE) como policação e o sulfato de condroitina (SC) como poliânion. Ambas as soluções dos polieletrólitos foram preparadas em água (pH 5,5), sem adição de ácidos ou bases. Ainda, na solução do policação, foi adicionado líquidos iônicos 0,016% m/V, com a finalidade de fornecer propriedades antimicrobianas aos MPEs. Além disso, os filmes foram avaliados por diversas técnicas como ângulo de contato, microscopia de força atômica, microscopia eletrônica de varredura, espectroscopia de fóton elétrons excitados por raios-X, elipsometria.

Resultados e discussão

Para promover uma melhor adesão dos revestimentos, os substratos de PET foram oxidados por 60 min utilizando persulfato de sódio 10% (m/V). Após oxidação, os polieletrólitos foram depositados alternadamente, sendo a primeira e a última camada a de gelatina ou gelatina contendo líquidos iônicos (LI).

Os ângulos de contato (AC) dos substratos sem e com oxidação foram avaliados e comparados com os

AC dos revestimentos, como apresentado na Tabela 1. Ainda, estudos de estabilidade dos revestimentos foram realizados, utilizando soluções tampões de pH 5,0 e 7,4.

Tabela1: Medidas de ângulo de contato dos substratos e MPEs

Amostra	AC (°) antes TE	AC (°) após TE pH5,0	AC (°) após TE pH7,4
PET sem modificação	90,9±1,6	**	**
PET oxidado	54,9±2,2	**	**
GE/SC	41,3±1,5	40,0±1,0	32,6±0,9
GE/SC C ₁₆ MImCl	44,5±1,0	40,3±1,2	
GE/SC C ₁₆ MImMeS	44,6±1,1	34,6±1,1	30,3±0,9
GE/SC C ₁₆ PyrCl	43,6±1,2	36,6±2,1	31,5±1,3

*TE= teste de estabilidade; **AC não investigado

Estudos de adesão e proliferação de bactérias foram realizados nas MEPs, onde o filmes contendo as macromoléculas GE/SC não apresentaram atividade antimicrobiana frente às bactérias estudadas, *Staphylococcus aureus* e *Pseudomonas aeruginosas*. Por outro lado os revestimentos contendo os LIs apresentaram atividades. Os filmes contendo LIs apresentaram o efeito bactericida frente as bactérias *Pseudomonas aeruginosas* e anti-adesiva frente as bactérias *Staphylococcus aureus*.

Conclusões

A combinação de polieletrólitos de cargas opostas proporcionou a obtenção de um revestimento para o PET apresentando atividade antimicrobiana. Os resultados mostram a potencial aplicação das MEPs nas áreas biomédica e de embalagem de alimentos.

Agradecimentos

Os autores agradecem a CAPES e CNPq (151710/2022-8) pelos recursos concedidos.

Referencias e notas

- [1] M. Hedayati, M.J. Kipper. Carbo. Pol., **2018**, 190, 346–355.
- [2] A. Guyomard, E. Dé, T. Jouenne, Adv. Funct. Mater. **2008**, 18, 758.
- [3] H. Ghasemzadeh, S. Afraz, M. Moradi, S. Hassanpour, Int. J. Biol. Mac., **2021**, 179 532–541.

Liberação rápida de paracetamol utilizando membranas eletrofiadas de PVP/VA

Vanessa Rong Jen Chang¹ (PG)*; Josiane Caetano¹ (PQ), Douglas Cardoso Dragunski¹ (PQ).

vanessajen@hotmail.com

1 – Universidade Estadual do Oeste do Paraná – Campus Toledo-PR -Rua Guaíra, 3141 - Jardim Santa Maria, Toledo - PR, 85903-220

Palavras Chave: fármaco, solubilidade, nanofibra, eletrofição, polímero.

Introdução

O desenvolvimento de sistema de administração de fármaco de liberação rápida, permite que o fármaco desintegre rapidamente na boca, eliminando a necessidade de engolir, mastigar ou ingerir com água (Illangakoon et al., 2014).

Um dos fármacos escolhidos para o estudo é o paracetamol (PCM), pois, possui baixa solubilidade em água, afetando a sua biodisponibilidade (Behara, S. et al., 2012). Optou-se por utilizar a técnica de eletrofição, pois o aumento da área superficial poderá aumentar a solubilidade do fármaco (Mercante et al., 2021). Essa técnica permite a produção de nanofibras carregadas com moléculas do fármaco com polímeros naturais ou sintéticos. O PVP/VA (poli(1-vinilpirrolidona)-co-(acetato de vinila)), pode ser utilizado como um polímero sintético na técnica de eletrofição, além disso é biodegradável e biocompatível (Martins et al., 2022).

O objetivo principal do projeto, é desenvolver uma membrana eletrofiada para promover a liberação rápida do fármaco de PCM inserido em nanofibra de PVP/VA, aumentando a sua solubilidade. Como o trabalho ainda está no processo inicial, atualmente foram produzidas quatro membranas eletrofiadas com diferentes quantidades de massas, com intuito de verificar a formação de nanofibras. Além disso, ajustando o melhor parâmetro para diminuir quantidade de *beads* nas nanofibras.

Resultados e discussão

Foi obtida quatro membranas, utilizando como solvente água destilada (3%) e etanol (97%), PVP/VA (35%) e diferentes quantidades de massa do PCM (10%, 20% e 30%) (m/v), utilizou-se por meio da técnica de eletrofição, com os seguintes parâmetros como demonstra na Tabela 1.

Dessa forma, para verificar a presença da formação de nanofibra, utilizamos o microscópio óptica (Figura 1). Comparando, com as imagens registradas, observa-se que apresenta muitos *beads* (“gotas”) na fibra. Para reduzir, esse fenômeno, é necessário ajustar os parâmetros. Com a modificação de tensão (V) não causou

nenhum efeito de redução (Figura-A, B e C). Portanto, com diminuição da umidade (U) foi possível perceber a redução de *beads*. Como demonstra em “A” que apresenta 70 a 65% de U, apresenta grandes *beads* e “D” apresenta menor quantidade. A diminuição de distância (d), entre agulha de injeção com o coletor da membrana, tem como intuito de evitar perda de amostra despejar ao redor do coletor.

Tabela 1. Parâmetros utilizados para produção da membrana eletrofiada

Amostra	d (cm)	T (°C)	V (kV)	U (%)
A	12	13	16,1	70 a 65
B	10 a 3,5	19 a 23	16 a 17,5	39 a 36
C	10 a 6	16	17,5 a 24	56 a 63
D	10 a 6	18,3	16	45 a 56

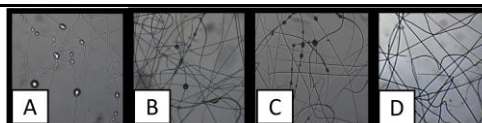


Figura 1. Nanofibras registrada pela microscopia óptica, com 10x de ampliação, com massas e parâmetros dos fármacos distintas: A) 10% PCM, B) 20% PCM, C) 30% PCM e D) 10% PCM.

Conclusões

Visualmente, foi possível coletar nanofibras de PVP/VA com o PCM por meio da técnica de eletrofição. Portanto, ainda é necessário realizar-se mais testes, para conferir os parâmetros adequados para diminuição de *beads*.

Agradecimentos

Unioeste, Capes, CNPQ e Fundação Araucária.

Referências e notas

- (1) Behara, S. et al. *UV-visible spectrophotometric method development and validation of assay of paracetamol tablet formulation. J Anal Bioanal Techniques.* **2012**, 3, 6, 151-7.
- (2) Illangakoon, U. *Eranka et al. Fast dissolving paracetamol/caffeine nanofibers prepared by electrospinning. International Journal. Pharmaceutics, United Kingdom.* **2014**, 477, 1-2, 369-379,.
- (3) Martins, L. M. et al. *Poly (1-vinylpyrrolidone-co-vinyl-acetate)-based electrospun dissolvable nanofibrous film for quercetin administration. Elsevier, Process Biochemistry.* **2022**, 122, 8-15,.
- (4) Mercante, L. A. et al. *Nanofibras eletrofiadas e suas aplicações: avanços na última década. Química Nova.* **2021**,. 44, 717-736,

EXTRAÇÃO DE SÍLICA A PARTIR DA PIRÓLISE DA CASCA DE ARROZ E TRATAMENTO ÁCIDO

Tallis Fernando Mendes (PG)¹, Danja R. Correa(PG)¹, Claissa Nied Peixoto (IC)¹, Gabriela Pereira Maciel (PQ)², José Eduardo Arruda(PQ), Raquel Giulian (PQ),Clarice Steffens(PQ), Rosângela Assis Jacques^{1*}(PQ)

¹Instituto de Química, UFRGS, RS, Brazil,²Departamento interdisciplinar UFRGS, Tramandaí

Introdução

No Brasil, o estado do Rio Grande do Sul desempenha um papel crucial na produção de arroz em casca, sendo responsável por aproximadamente 70% de todo o volume produzido no país. No entanto, a produção em larga escala de casca de arroz apresenta um desafio ambiental significativo devido à sua falta de valor comercial, devido à natureza rígida, fibrosa e abrasiva do material. Este estudo tem como objetivo investigar a obtenção de sílica a partir da casca de arroz proveniente do RS, por meio de diferentes tratamentos utilizando ácido cítrico e pirólise.

Resultados e discussão

Para determinar a rota mais eficiente para a obtenção de sílica a partir da casca de arroz utilizando ácido cítrico, foram conduzidos seis processos de tratamento e queima das amostras. Os diversos métodos de tratamento e purificação empregados estão ilustrados na Figura I.

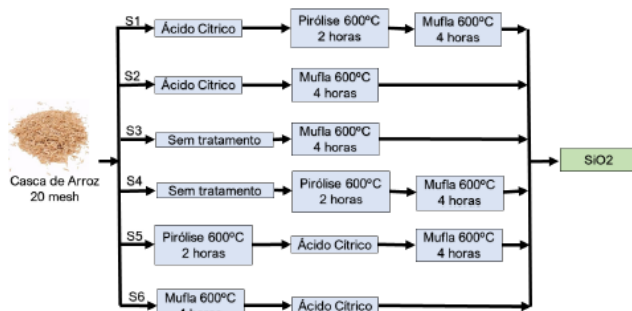


Figura I: Fluxograma dos processos (S1–S6) realizados de tratamento e queima da casca de arroz.

A análise PIXE revelou que as amostras de casca de arroz são ricas em silício, com os picos de maior amplitude indicando uma concentração predominante desse elemento, como mostrado na Figura II. O Fe e o Mn foram detectados em todas as amostras analisadas, com valores variando entre 220 e 9758 mg.L⁻¹ para o Fe, entre 15,24 e 1602 mg.L⁻¹ para o Mn, e entre 158,5 e 1575 mg.L⁻¹ para o Ti. Elementos como sódio (Na), magnésio (Mg), alumínio (Al), fósforo (P), enxofre (S), cloro (Cl), cromo (Cr), níquel (Ni), cobre (Cu), zinco (Zn) e arsênio (As) estão presentes em concentrações menores.

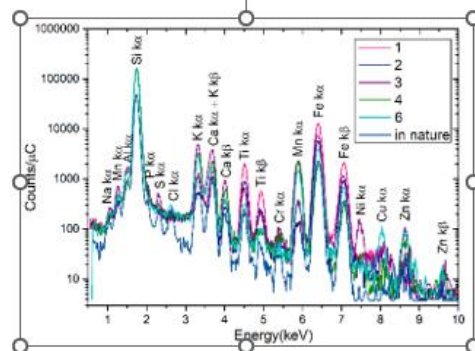


Figura II: Espectro PIXE para as amostras de cinza da casca de arroz tratadas com cítrico

Conclusões

Os resultados experimentais deste trabalho demonstram a viabilidade de produzir sílica de alta pureza a partir da casca de arroz por meio de processos simples de lixiviação com soluções ácidas, utilizando ácido orgânico.

Referências

1-V. B. Carmona, R. M. Oliveira, W. T. L. Silva, L. H. C. Mattoso, and J. M. *Ind Crops Prod*, vol. 43, no. 1, pp. 291–296.2013, doi: 10.1016/j.indcrop.2012.06.050

Tecidos de PES e mescla PES/CO funcionalizados com nanopartículas de ZnO visando avaliar as propriedades tintoriais e morfológicas

Tatiana C. de Amorim¹ (PG)*, Renato A. Gomes¹ (G), Thaynna R. Heckert¹ (G), Lizandra M. Zimmermann¹ (PQ), Ivonete O. Barcellos¹ (PQ). *tatianacristinedeamorim@gmail.com.

¹Departamento de Química, Universidade Regional de Blumenau (FURB), Blumenau, SC, Brasil.

Palavras-Chave: Nanopartícula, ZnO, PES, PES/CO, Impregnação, Tingimento.

Introdução

A indústria têxtil, uma das mais antigas, necessita se reinventar e produzir cada vez mais produtos com funcionalidades diferenciadas, como proteção UVA-UVB e proteção biológica, e que sejam confortáveis e atrativos aos consumidores. O objetivo deste trabalho foi sintetizar e caracterizar nanopartículas (NPs) de ZnO visando avaliar a influência da incorporação das NPs nas propriedades tintoriais e morfológicas em tecidos de poliéster (100 % PES) e mescla com algodão (PES/CO).

Resultados e discussão

As NPs, sintetizadas por meio da técnica sol-gel, foram caracterizadas por espectrofotometria de absorção UV-vis, DLS (5,9 nm) e FTIR-ATR (banda forte de Zn-O-Zn visível em 450 cm⁻¹). Todas as sínteses tiveram a sua fluorescência testada em câmara com lâmpada UV 365 nm. Tecidos de PES e PES/CO foram preparados, tingidos e funcionalizados, por impregnação em Foulard, para avaliar as suas propriedades tintoriais e morfológicas.

Tabela 1. Resultados obtidos para a determinação das propriedades tintoriais em diferentes T (°C) de impregnação.

Condição (% NPs de ZnO)	PES		PES/CO		
	K/S ^{DP}	Fr% ^{DP}	K/S ^{DP}	Fr% ^{DP}	
70 °C	Controle	13,170	100,0	9,075	100,0
	0,075	14,683 ^{0,15}	111,5 ^{1,13}	9,271 ^{0,13}	102,2 ^{1,47}
	0,100	15,852 ^{0,06}	120,4 ^{0,45}	10,476 ^{0,10}	115,4 ^{1,12}
	0,125	13,582 ^{0,12}	103,1 ^{0,91}	11,135 ^{0,43}	122,7 ^{4,79}
100 °C	Controle	12,724	100,0	9,222	100,0
	0,075	13,426 ^{0,13}	104,9 ^{0,24}	10,903 ^{0,68}	118,2 ^{7,34}
	0,100	13,556 ^{0,18}	106,4 ^{1,29}	10,973 ^{0,53}	119,0 ^{5,79}
	0,125	13,708 ^{0,13}	107,4 ^{0,59}	11,017 ^{0,10}	119,5 ^{1,10}
130 °C	Controle	13,365	100,0	9,500	100,0
	0,075	13,892 ^{0,11}	104,4 ^{0,16}	11,324 ^{0,04}	119,2 ^{0,40}
	0,100	13,599 ^{0,02}	101,8 ^{0,18}	10,899 ^{0,79}	114,7 ^{8,33}
	0,125	13,236 ^{0,04}	99,0 ^{0,28}	10,349 ^{0,08}	108,9 ^{0,85}

DP = Desvio Padrão

A partir das micrografias obtidas através da lupa estereoscópica para avaliação da superfície das amostras, não foi observada nenhuma alteração na estrutura da malha para as diferentes condições de aplicação.

Tabela 2. Resultados obtidos para determinação da gramatura de superfícies têxteis, em g m⁻³.

Condição (% NPs de ZnO)	PES Preparado			PES Tinto		
	70 °C	100 °C	130 °C	70 °C	100 °C	130 °C
Controle	1,56 ^{0,01}	1,50 ^{0,01}	1,59 ^{0,02}	1,81 ^{0,01}	1,77 ^{0,01}	1,75 ^{0,02}
0,075	1,56 ^{0,01}	1,56 ^{0,01}	1,57 ^{0,01}	1,82 ^{0,01}	1,75 ^{0,01}	1,66 ^{0,01}
0,100	1,60 ^{0,02}	1,49 ^{0,01}	1,57 ^{0,00}	1,76 ^{0,06}	1,73 ^{0,03}	1,72 ^{0,00}
0,125	1,52 ^{0,01}	1,54 ^{0,01}	1,51 ^{0,00}	1,76 ^{0,01}	1,73 ^{0,01}	1,70 ^{0,01}
Condição (% NPs de ZnO)	PES/CO Preparado			PES/CO Tinto		
	70 °C	100 °C	130 °C	70 °C	100 °C	130 °C
Controle	1,47 ^{0,00}	1,47 ^{0,01}	1,51 ^{0,01}	1,60 ^{0,01}	1,63 ^{0,01}	1,58 ^{0,01}
0,075	1,55 ^{0,01}	1,55 ^{0,01}	1,50 ^{0,00}	1,60 ^{0,01}	1,59 ^{0,01}	1,59 ^{0,00}
0,100	1,49 ^{0,01}	1,46 ^{0,01}	1,48 ^{0,00}	1,62 ^{0,01}	1,60 ^{0,00}	1,60 ^{0,00}
0,125	1,54 ^{0,01}	1,52 ^{0,01}	1,57 ^{0,01}	1,59 ^{0,01}	1,59 ^{0,01}	1,60 ^{0,01}

DP = Desvio Padrão

Conclusões

Observou-se influência da aplicação das NPs de ZnO nos tecidos de PES (melhor condição: concentração de 0,100 % m/m a 70 °C). Tecidos de mescla apresentaram melhoras superiores nas propriedades tintoriais que os tecidos de PES (100 %). A partir das imagens obtidas pela lupa estereoscópica, verificou-se que a aplicação das NPs não alterou as características estruturais dos tecidos. Tecidos de PES apresentaram gramaturas menores que os tecidos de PES/CO para todas as condições de estudos. Estudos em andamento compreendem avaliar a interferência da aplicação das NPs nos tecidos de PES e mescla nas propriedades físicas, físico-químicas e efeitos como fotoproteção e antimicrobiano.

Agradecimentos



fapesc
 Fundação de Amparo à
 Pesquisa e Inovação do
 Estado de Santa Catarina

Síntese e Caracterização de Hidrogéis Híbridos Baseados em Grafeno e Nanotubos de Carbono

Gabriel F. Murillo* (IC), Carolina F. M. Jauris (PQ).

Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria. gabriel.murillo@acad.ufsm.br*

Palavras chave: Hidrogéis, nanotubos de carbono, óxido de grafeno, nanoarquitetura

Introdução

Os nanomateriais de carbono representam uma classe diversificada de materiais, com propriedades variadas e excepcionais, o que os tornam adequados para inúmeras aplicações. Nesse sentido há uma necessidade incisiva de procurar novas arquiteturas envolvendo esses materiais por meio de métodos sustentáveis. No entanto a boa parte das estratégias convencionais de preparação desse tipo de materiais envolvem o uso de grandes quantidades de energia, solventes tóxicos e muitas etapas, encarecendo o inviabilizando o escalonamento, o que reforça a demanda pelo desenvolvimento de estratégias de sínteses custo-efetivas de produção. Os hidrogéis baseados em grafeno, são exemplos desses materiais, e apresentam uma infinidade de aplicações, desde a remoção de contaminantes de interesse ambiental, no sensoriamento analítico, até o armazenamento de energia. Sob essa perspectiva, no intuito de aumentar essa multifuncionalidade, este trabalho tem por objetivo a nano arquitetura e caracterização de hidrogéis híbridos baseados em grafeno e nanotubos de carbono. Os materiais foram preparados por meio de uma rota desenvolvida e patenteada pelo nosso grupo [1]. Todo processo envolve a redução termoquímica do óxido de grafeno (GO), em autoclave, na presença de diferentes tipos de nanotubos de carbono (multicamadas (MWCNT) e camada simples (SWCNT)) e do agente redutor (ácido ascórbico). O GO foi inicialmente utilizado como surfactante para a dispersão dos nanotubos. Para a formação dos hidrogéis foram mantidas fixas as proporções entre o GO e os NTCs (1:1) e variada a porcentagem do redutor nas sínteses em 0, 5, 10 e 25 mmol/L. As amostras foram caracterizadas por Microscopia de Força Atômica (AFM) e Espectroscopia no Infravermelho (FTIR-ATR) e Espectroscopia Raman. Medidas de área superficial, Microscopia eletrônica de Varredura (MEV), difratometria de raios X estão em andamento.

Resultados e Discussões

Diferentes hidrogéis foram obtidos com sucesso a partir da redução do óxido de grafeno (GO) na presença de diferentes tipos de nanotubos de carbono e em uma única etapa e por meio de uma rota sustentável. Por AFM foi possível comprovar a efetividade do GO como um

surfactante para dispersar os NTCs em meio aquoso. Em menos de duas horas em autoclave, foram obtidos materiais que apresentaram uma estrutura tridimensional porosa, (com exceção das amostras sem agente redutor) coesa e auto suportada. Como pode ser observado na imagem fotográfica (Figura 1) abaixo.

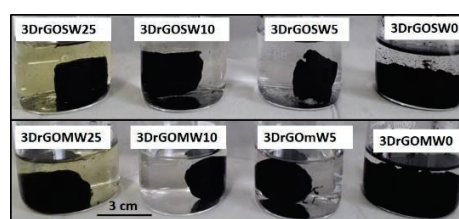


Figura 1. Imagem fotográfica dos hidrogéis baseados em grafeno e nanotubos de carbono recém obtidos.

Foi avaliado o efeito de diferentes quantidades do agente redutor. Observou-se que pequenas variações no teor ácido ascórbico promoveram alterações morfológicas e estruturais significativas. Os resultados de FTIR indicaram a redução efetiva do GO à óxido de grafeno reduzido. Essa observação foi confirmada por espectroscopia Raman. Ainda por Raman e por dados preliminares de microscopia, foi possível observar que a presença e o tipo de NTCs no meio afeta a forma como as folhas de GO são reduzidas e estruturam o hidrogel formando materiais com arquiteturas (porosidades, grau de empacotamento, funcionalização) diferenciadas. Outras caracterizações permitirão em breve uma melhor compreensão do mecanismo de formação desses hidrogéis.

Conclusões

Nesse trabalho foram obtidos por uma rota ambientalmente amigável diferentes hidrogéis baseados em grafeno e nanotubos de carbono. Os hidrogéis apresentaram características morfológicas e estruturais fortemente dependentes da quantidade do agente redutor e do tipo de nanotubo de carbono utilizado. Os materiais apresentam características para serem aplicados em múltiplas funções.

Agradecimentos

FAPERGS (21/2551-00007362), INCT-Nanocarbono, INCT-Nanovida, CNPq (406391/2021-1 e bolsa PROBIC)

NANOCOMPÓSITO DE HIDROXIAPATITA EM MATRIX DE POLIÉSTERS

Samuel Willian Gregório^{1*}(IC), Marcia Margarete Meier¹(PQ), Daiara Floriano da Silva²(PQ)

¹ Universidade do Estado de Santa Catarina (UDESC) – samuel.w.gregorio@gmail.com

² DnPrime Nanomateriais

Palavras Chave: Biomaterial, Compósito, Hidroxiapatita.

Introdução

Quando grande extensão de tecido ósseo é perdido, faz-se uso, por exemplo, de blocos de materiais cerâmico osseointegradores, composto de fosfatos de cálcio, como a hidroxiapatita. Devido a fragilidade de peças cerâmicas frente a aplicação de tensões, compósitos de base polimérica contendo substâncias ósseo indutoras como a Hidroxiapatita (HAp) vem sendo

investigados no ramo de implantes, porém utilizando baixos teores de HAp. (1,2,3).

Considerando isto, o presente trabalho teve como objetivo desenvolver estratégias para incorporar HAp em pó em matriz polimérica de policaprolactona (PCL) e poli(ácido láctico) (PLA) formando compósitos com 50, 60, 70% m/m de HAp. Investigou-se o efeito da (F) da superfície da HAp com 3-glicidiloxi propiltrimetoxisilano (conhecido comercialmente como Glymo) visando promover a formação de ligações covalentes entre mineral e matriz polimérica.

Resultados e discussão

Resultados de análise termogravimétrica e FTIR indicam fissiosorção de Glymo na superfície das partículas de HAp, devido a reação de condensação. A Figura 1 apresenta os resultados dos ensaios mecânicos realizados com os compósitos. Ao comparar os dois polímeros observa-se que PCL apresenta valores menores de módulo de elasticidade quando comparado ao compósito de PLA. Ao avaliar o efeito do teor de HAp, não se observou alteração significativa das propriedades. Para analisar o efeito da funcionalização da HAp com Glymo compara-se grupos com mesmo teor de partícula. Nos compósitos HAp/PCL se observou efeito da funcionalização no grupo contendo 60% de HAp, levando ao aumento do módulo de elasticidade. Isso está coerente com a hipótese de formação de ligação covalente entre o grupamento epóxi do Glymo e

as cadeias de PCL. Por outro lado, esse comportamento não se reproduziu para o compósito de PLA.

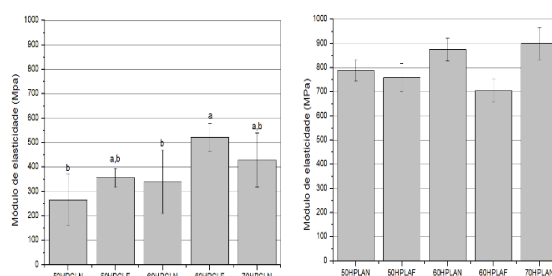


Figura 1. Comparação do módulo de elasticidade via ensaio de compressão compósito de PCL (esquerda) e PLA (direita) contendo 50, 60, 70% de funcionalização com Glymo (F) ou sem (N). Letras diferentes indicam diferença estatística significativa entre os grupos (ANOVA, $p < 0,05$).

Conclusões

Os dados obtidos até o momento permitem concluir que o aumento de teor de HAp não alterou significativamente as propriedades medidas, e que para 60% de HAp-Glymo em PCL (60HPCLF) a funcionalização aumentou o módulo de elasticidade, corroborando com a hipótese de formação de ligação covalente entre HAp-PCL, mediada por Glymo.

Agradecimentos

Agradecemos à UDESC, ao e a FAPESC.

Referencias e notas

- (1) C. Aversa, M. Barletta, E. Pizzi, M. Puopolo, S. Vesco, *Wear* 390–391 (2017) 184.
- (2) Serafini GMC, Müller DCM, Pippi Ney Luis. *Medvop - Revista Científica de Medicina Veterinária - Pequenos Animais e Animais de Estimação*; 2016; 14(44); 102.
- (3) ZANINI ASSEM, N., Bauru: Universidade de São Paulo, 2019. <https://doi.org/10.11606/T.25.2019.tde-20112019-210125>.

Síntese de Zeólita sem direcionador diretamente das cinzas de casca de arroz.

Mirian Dosolina Fusinato¹(PG), Shayla Santos Lopes²(IC), Timóteo Casarin Pereira (IC)², Pedro José Sanches Filho(PQ)², Diego Gil de los Santos² (PQ), Daniel Assumpção Bertuol³(PQ), Adreano Gomes Spessato¹(PG), Camila Ottonelli Calgaro²(PQ)*.

¹ Universidade Federal de Pelotas (UFPEl)

²Instituto Federal de Educação Sul-rio-grandense (IFSul) – Campus Pelotas - *camilacalgaro@ifsul.edu.br

³ Universidade Federal de Santa Maria (UFSM)

Palavras Chave: ZSM-5, semente, aluminossilicato, síntese hidrotérmica.

Introdução

As zeólitas possuem várias aplicações, como catalisadores, em processos de troca iônica, como adsorventes e peneiras moleculares. Um dos métodos de síntese da zeólita é o hidrotérmico, com a presença de sílica e alumina. As cinzas de casca de arroz (CCA) possuem em torno de 90% em massa de sílica¹, sendo assim excelentes precursores para a síntese da zeólita. As CCA, é um resíduo disponível em grande quantidade na região de Pelotas-RS, devido à grande produção e beneficiamento de arroz. Caso essas cinzas sejam dispostas inadequadamente no ecossistema, elas podem provocar danos aos seres humanos e ao próprio ambiente. Diante disso, esse estudo teve como objetivo utilizar as CCA diretamente como fonte de sílica para síntese de zeólita, sem uso de direcionador, e apresentar uma alternativa para aplicação sustentável desse resíduo.

Resultados e discussão

As CCA utilizadas nesse estudo foram cinzas volantes de caldeira, cedidas por uma indústria de Pelotas-RS. O método hidrotérmico foi empregado para a síntese da zeólita², mas sem direcionador. A Figura 1, apresenta as etapas empregadas na síntese e a imagem das CCA utilizadas, da semente utilizada (ZSM-5 sintetizada com sílica previamente extraída de CCA e sem direcionador) e da zeólita obtida.

A Figura 2, apresente os difratogramas da semente de zeólita ZSM-5 e da zeólita obtida. É possível observar que ambos os difratogramas os principais picos correspondentes a uma zeólita do tipo ZSM-5: $2\theta = 7,99^\circ, 9,14^\circ, 23,21^\circ, 23,65^\circ$ e $24,38^\circ$. Contudo, o pico principal da zeólita produzida diretamente das cinzas ($2\theta = 21,8^\circ$) corresponde a cristobalita, que é uma fase cristalina da sílica.



Figura 1. Fluxograma da das etapas da síntese da zeólita

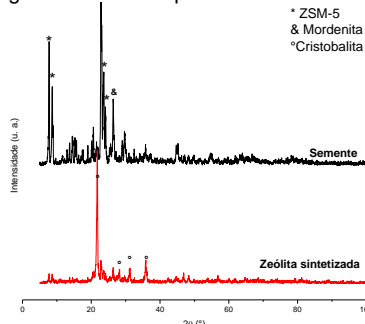


Figura 2. Difratograma da semente e da zeólita produzida.

Conclusões

A partir da calcinação das CCA foi possível obter uma zeólita do tipo ZSM-5 juntamente com uma fase cristalina da sílica, a cristobalita.

Agradecimentos

Ao IFSul e a Fapergs (Projeto: 20/2551-0000441-4).

Referências e notas

- (1) Fusinato, M. D.; da Silva Amaral, M. A. F.; de Irigon, P. I.; Calgaro, C. O.; de los Santos, D. G.; Filho, P. J. S. *Environ. Sci. Pollut. Res.* **2022**, No. 0123456789.
- (2) Peron D V., Zholobenko VL et al. *Microporous Mesoporous Mater.* **2019**;286(March):57–64.

Hidrogéis nanocompósitos de goma xantana e óxido de grafeno reticulados com a água ruça residual da produção do azeite de oliva e sua aplicação para soluções na agricultura

Gabriele Zuge (PG)¹, Jaqueline P. Vargas (PQ)¹, Carolina Ferreira de Matos Jauris (PQ)^{*1,2}

carolina.matos@ufsm.br

¹ Centro de Ciências e Tecnologia Ambiental, Universidade Federal do Pampa Campus Caçapava do Sul-RS

² Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria- Santa Maria RS

Palavras Chave: Nanomateriais, hidrogéis, reticulação, azeite de oliva, oxido de grafeno, agricultura,

Introdução

Segundo dados do Instituto Brasileiro de Olivicultura o Brasil é o segundo maior importador de azeite do mundo, produzindo só 1% do que consome. Em 2023 a produção doméstica expandiu, alcançando mais de 705 mil litros de azeite. Essa expansão embora seja economicamente benéfica econômico traz consigo um grande problema: de toda oliva processada são gerados 20% de azeite e 80% de resíduo. E esse resíduo tem se tornado um problema ambiental muito caro e difícil de tratar, pois a carga poluente chega a ser 400 vezes superior ao do esgoto doméstico. Ao mesmo tempo em que esses resíduos são problemáticos as suas composições são quimicamente interessantes para serem exploradas. Nesse sentido o objetivo desse trabalho é apresentar soluções para o aproveitamento desses resíduos no desenvolvimento de nanomateriais sustentáveis. Como a utilização da água ruça (AR), água residual do processo, para reticulação de hidrogéis de goma xantana e óxido de grafeno (GO) visando aplicações no condicionamento do solo e liberação controlada de nutrientes. Basicamente o processo de síntese dos hidrogéis ocorre em duas etapas a preparação do polímero com a adição ideal de água para a formação do gel; e a adição do agente reticulante, com e sem GO. Quantidades variando de 3,3% a 16,6% de água ruça foram avaliadas. Os hidrogéis foram testados quanto ao grau de intumescimento e liberação de água e nutrientes, além da caracterização por espectroscopia no Infravermelho, análises termogravimétricas e microscopia eletrônica de varredura.

Resultados e discussão

Os resultados dos testes de intumescimento e FTIR demonstraram que a água ruça incorporada atua como reticulante na matriz polimérica. Os hidrogéis reticulados apresentaram um aumento da resistência mecânica e grande capacidade de intumescimento, absorvendo

valores excepcionais de água, de 80 a 120 vezes seu peso inicial seco. Como pode ser observado na Figura 1.

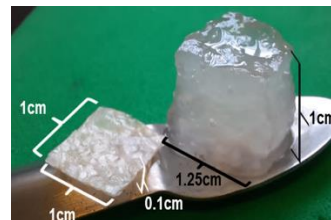


Figura 1. Hidrogel de goma xantana e óxido de grafeno antes e após intumescimento com água.

Nos testes de liberação de água, o nanocompósito de GO e AR liberou mais controladamente do que o hidrogel com apenas a água ruça, e ambos, retiveram água por 7 dias, mas liberaram de formas distintas e suportaram bem condições extremas de alcalinidade e acidez. Resultados semelhantes foram observados para a liberação de NPK. Análises termogravimétricas evidenciaram que a adição da água ruça aumenta a estabilidade térmica do material, em especial quando combinado com o GO. Ensaio de biodegradabilidade indicaram que após 4 meses o hidrogel degradou apenas 14%, enquanto o nanocompósito de com GO degradou 6%, ideal para culturas mais longas.

Conclusões

Hidrogéis nanocompósitos de goma xantana e óxido de grafeno reticulados com a água ruça residual da produção do azeite de oliva foram obtidos com sucesso. As caracterizações demonstraram a potencialidade dos materiais como possíveis agentes para liberação da controlada de água e nutrientes no solo para agricultura

Agradecimentos

FAPERGS (21/2551-00007362), INCT-Nanocarbono, INCT-Nanovida e CNPq (406391/2021-1)

Incorporação de óxidos de ferro em quitosana para estudo de adsorção.

Bruna Cristina Badalotti (IC)*, Reinaldo Aparecido Bariccatti (PQ).

bruna1234badalotti@gmail.com;

¹Cento de Engenharias e Ciências Exatas, Unioeste – Campus Toledo – PR.;

Palavras-Chave: Nanopartículas, Adsorção, Magnéticas.

Introdução

As nanopartículas são sistemas que possuem diâmetros inferiores a 100 nm,¹ esse sistema tem grande interesse tecnológicos, dada a sua ampla aplicação em meio ambiente, alimentos e fármacos.² Dentre as nanopartículas temos as partículas magnéticas que possuem propriedades interessantes como alta área superficial e ferromagnetismo, podendo ser aplicadas em processos de adsorção.³

Resultados e discussão

Para o estudo de equilíbrio de adsorção se faz necessário conhecer a quantidade de corante adsorvida. Para isto, preparou 8 soluções com diferentes concentrações com objetivo de estudar o efeito da concentração do corante na intensidade de absorção, este estudo é conhecido como determinação do coeficiente de absorção molar do corante. Na Figura 1, é observado o espectro de absorção das soluções de eritrosina em contato com o adsorvente e sem adicionar adsorvente (inserido). Observa-se uma redução na intensidade de absorção em relação as soluções originais relacionada à adsorção do corante.

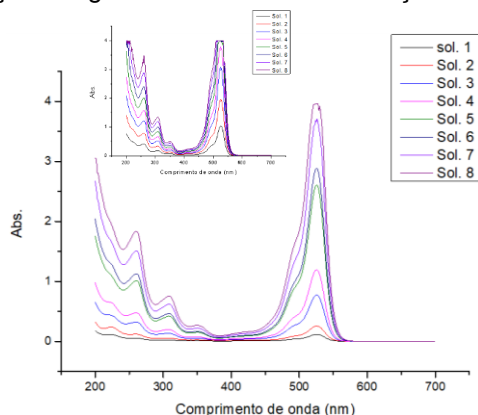


Figura 1. Gráfico com os espectros de UV-VIS da eritrosina em contato adsorvente e sem contato (inserido)

Utilizando o coeficiente de absorção molar de $\epsilon=10.650 \text{ L cm}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ e a intensidade máxima de absorção (308nm), determinou a concentração do corante livre em solução após 24 horas na presença do adsorvente, representado na Figura 01. Para determinar

o melhor modelo de adsorção testou os modelos de Langmuir e Freundlich (Figura 02), dentre estes o modelo com melhor ajuste foi o modelo de Freundlich ($Y=A.X^b$, com R^2 de 0,864) com $A=1,50$ e $b=0,29$, adsorvendo cerca de 0,09 g de corante por grama de adsorvente.

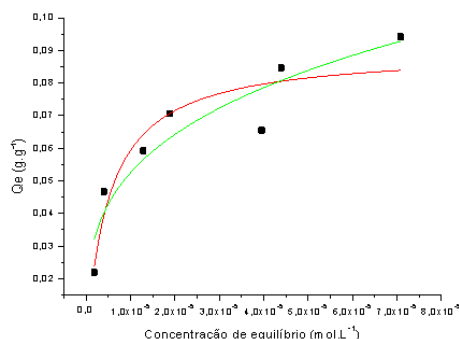


Figura 02. Gráfico das curvas de adsorção segundo Langmuir (vermelho) e Freundlich (verde).

Conclusões

A adsorção entre eritrosina e o composto foi efetiva, sendo o modelo que melhor ajustou foi o de Freundlich.

Agradecimentos

Fundação Araucária, UNIOESTE, GIPeFEA e CNPq.

Referências e notas

- (1) Poole; C.P. & Owens; F. J. (2003). Introduction to nanotechnology, New York: Wiley- Interscience.
- (2) Ferreira H. S. e Rangel M. C. (2009). Nanotecnologia: Aspectos Gerais e Potencial da Aplicação em Catálise. Química. Nova, 32, 1860-1870.
- (3) Hasany, S. F.; Abdurahman, N. H.; Sunarti, A.R., Jase, R. (2013). Magnetic Iron Oxide Nanoparticle: Chemical Synthesis and Applications Review. Current Nanoscience, 9, 561-575.

Estudo da Degradação da Rodamina B e Avaliação da Influência da Acidez do Meio

Giovanna Vulcão Colares^{1*} (IC), Brenda Koch¹ (IC), Caroline Maroli¹ (PG), Daniela Zambelli Mezalira¹ (PQ).

*giovulcao123@gmail.com;

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), Florianópolis - SC.

Palavras Chave: Fotocatálise, Óxido de nióbio, Rodamina B.

Introdução

O corante Rodamina B (RhB) é nocivo ao meio ambiente e à saúde, tornando sua degradação uma solução relevante. A fotodegradação é uma metodologia bastante descrita na literatura, porém um processo bastante novo e pouco explorado envolve a utilização de HO[•]/H₂O₂ para a remoção da RhB presente em meio aquoso^{1,2}. Nesse trabalho avaliou-se a degradação da RhB em pH ácido e básico.

Resultados e discussão

A fotodegradação da RhB foi investigada seguindo a metodologia apresentada na **Figura 1**.

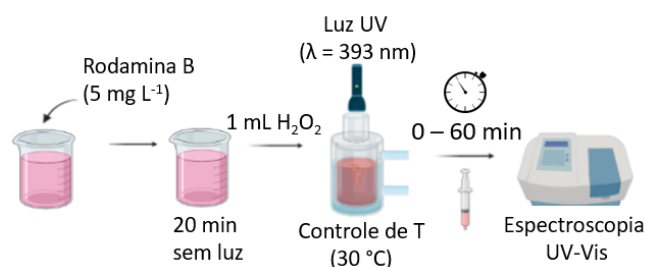


Figura 1. Metodologia de fotodegradação da Rodamina B.

A **Figura 2** mostra os espectros da degradação da RhB durante o tempo reacional de 60 min.

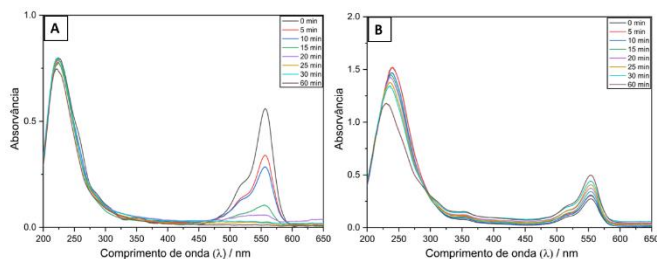


Figura 2. Espectros de absorção UV-vis da fotodegradação de Rodamina B em pH a) ácido e b) básico.

Foi possível observar que em pH ácido (A) a fotodegradação é consideravelmente rápida, mostrando uma diminuição da coloração do corante nos primeiros minutos e alcançando a total descoloração em 25 min de reação. Por outro lado, a reação em pH básico (B) não apresentou degradação dentro do tempo de 60 min, porém, foi possível verificar na **Figura 3**, que o processo se manifestou após 24 horas da reação, mesmo na ausência da luz UV.

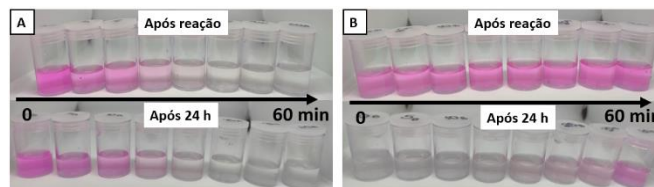


Figura 3. Fotografias das alíquotas, logo após a reação e 24 h após a reação, em pH a) ácido e b) básico.

Essa observação indica a presença de um mecanismo de degradação da RhB que não está vinculado à influência de fótons, mas, em vez disso, é mediado pela interação entre HO[•] e H₂O₂ em um meio aquoso.

Conclusões

Os resultados destacaram que, em meio ácido, ocorreu a degradação da RhB na presença do fotocatalisador Nb₂O₅. Em meio básico o processo só se manifestou após 24 horas estando vinculado a interação entre HO[•] e H₂O₂ em um meio aquoso.

Agradecimentos

UFSC, CNPq, CAPES, CBMM e LOOSA.

Referencias e notas

- (1) C.L. Ücker et al. *Ceramics International* **2021**, 47, 20570–20578.
- (2) Silvestro, L.; et al. *Materials* **2023**, 16, 4090

Impressão 3D de hidrogéis compósitos contendo biochar de casca de arroz para adsorção de contaminantes orgânicos em água da torneira

Victória R. Soares (IC)*, Emilly C. Silva (PG), Andressa B. Nörnberg (PG), André R. Fajardo (PQ)*

*victoriarossoares@gmail.com

Laboratório de Tecnologia e Desenvolvimento de Compósitos e Materiais Poliméricos (LaCoPol), Universidade Federal de Pelotas (UFPel), Campus Capão do Leão s/n, 96010-900, Pelotas-RS, Brasil.

Palavras-Chave: Manufatura aditiva, biomassa residual, polissacarídeos, contaminantes emergentes, remediação de água.

Introdução

O desenvolvimento industrial trouxe progressos marcantes para a sociedade, mas também trouxe desafios ambientais¹. Dentre esses desafios, a demanda crescente por recursos como água potável exige o tratamento e descontaminação de águas residuais para remover vários contaminantes, como metais, corantes e produtos farmacêuticos. Atualmente, as estações de tratamento de água/esgoto tradicionais não são capazes de remover completamente esses contaminantes². Portanto, neste trabalho, hidrogéis compósitos impressos em 3D foram produzidos, caracterizados e aplicados na adsorção de ibuprofeno (IBU) e azul de metileno (MB). O processo foi avaliado por meio de uma série de experimentos de adsorção em batelada, incluindo análises cinéticas e isotérmicas. Todos os experimentos foram realizados em água de torneira, uma amostra próxima a realidade.

Resultados e discussão

Hidrogéis compósitos em formato de discos (Fig. 1) foram fabricados por meio de impressão 3D usando tintas preparadas com alginato (Alg), Nafion® e biochar (1 a 10% m/m).

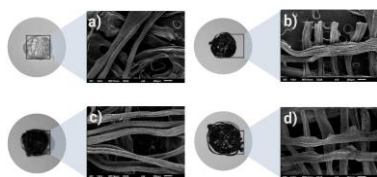


Figura 1. Imagens fotográficas e de MEV dos hidrogéis impressos (a) Alg, (b) Alg/Biochar1, (c) Alg/Biochar5 e (d) Alg/Biochar10. (Magnificação MEV x55 e escala 200 µm).

Análises de caracterização confirmaram a presença de biochar nas matrizes de hidrogel e indicaram sua interação com alginato, facilitada pela natureza lignocelulósica do biochar. A incorporação de biochar resultou em mudanças em diferentes propriedades dos

hidrogéis compostos, como estrutura, densidade de reticulação, morfologia e capacidade de intumescimento. Para avaliar a aplicabilidade dos hidrogéis impressos como adsorventes para a remoção de IBU e MB da água da torneira, experimentos em lote foram executados. O hidrogel compósito apresentou um aumento de 48% na capacidade de adsorção para IBU e um aumento de 58% para MB. Essas melhorias foram atribuídas ao aumento dos sítios de adsorção fornecidos pelo biochar e às propriedades intrínsecas resultantes da formação do compósito. A adsorção de IBU e MB nos hidrogéis impressos seguiu cinética de ordem pseudo-primeira, e as análises isotérmicas indicaram que a adsorção ocorreu por meio de uma combinação de processos de superfície e multicamadas, bem sentida pelo modelo de Freundlich. Além disso, o hidrogel apresentou alto índice de reaproveitamento e durabilidade, demonstrado por meio de 20 ciclos de adsorção e dessorção.

Conclusões

Este estudo apresenta um método inovador para preparar adsorventes eficientes por meio de impressão 3D, utilizando uma combinação de polissacarídeo e biochar. Os dados obtidos podem ser valiosos para pesquisadores em vários campos e têm aplicações práticas no tratamento de água.

Agradecimentos

Os autores agradecem às redes de fomento CNPq e CAPES.

Referências e notas

- (1) Yu, F.; Yang, P.; Yang, Z.; Zhang, X.; Ma, J. *Chem. Eng. J.* **2021**, 426, 131900.
- (2) Godiya, CB; Cheng, X.; Li, D.; Chen, Z.; Lu, X. *J. Hazard. Amigo.* **2019**, 364, 28–38.



SBQ SUL

29º Encontro de Química da Região Sul

Um olhar para o futuro

ENSINO DE QUÍMICA

Sessões Coordenadas

19 de outubro (Quinta-feira) - Sala 310

	Palestrante: Prof. Dr. Roberto Dalmo (UFPR) <i>“Conhecimentos químicos para sobreviver ao apocalipse zumbi: uma experiência formativa”</i>
EDU 003	Representatividade feminina, divulgação científica e inserção social a partir do PPGQTA: “Gurias na Ciência” – Ação nas escolas. <i>Daniele Müller (PG), Alessandra da Costa (PG), Márcia Silveira (TC), Emanuele Lessa (PG), Juliane Silva (PG), Tainá Saúgo (PG), Bruna Silva (IC), Jessica Mota (IC), Adriana Neves (PQ), Aline Dorneles (PQ), Angelita Barcellos (PQ), Luísa Reinheimer (PG), Maura Peixoto (PG), Fernanda Ludwig (PG), Roseane D’Avila (TC), Lisliane Kickofel (PG), Rafael Brinkerhoff (TC), Vânia de Lima (PQ) - FURG</i>
EDU 008	Mapeando a Contribuição das Mulheres na Ciência: Um Estudo Bibliográfico. <i>Bruna Botelho Silva (IC), Alessandra Gomes da Costa (PG), Aline M. Dorneles (PQ) - FURG</i>
EDU 022	Estudos de caso sobre fármacos para abordagem de estereoquímica no Ensino Superior. <i>Flávia M. Bernardi (PG), Maurícus S. Pazinato (PQ) - UFRGS</i>
EDU 027	Reatividade de jóias utilizadas como adornos: análise de uma sequência didática. <i>Valdecir da Silva Junior (IC), Emily Karine dos S. Silva (IC), Fabiele Cristiane D. Broietti (PQ) - UEL</i>
EDU 032	Experimentação investigativa: Uma nova perspectiva para o futuro da química. <i>Maria Eduarda Batista Teixeira (IC), Fábio André Sangiogo (PQ), Bruna Adriane Fary (PQ), Diogo La Rosa Novo (PQ) - UFPEL</i>

20 de outubro (Sexta-feira) - Sala 310

	Palestrante: Prof. Dr. Maurícus Selvero Pazzinato (UFRGS) <i>“Explorando possibilidades de Metodologias Investigativas e Centradas no Estudante no Ensino da Química”</i>
EDU 001	Desenvolvimento de uma tabela periódica 3D acessível para a promoção da educação inclusiva em química. <i>Lucas Gonçalves (IC), Matheus M. Camargo (IC), Ana Luisa M. Mesquita (IC), Ana Paula Dalsenter (IC), Beatriz Fernanda da Silva (IC), Fabiana S. Corrêa (PQ) - UFSC</i>
EDU 007	Ensino de química e desenvolvimento sustentável: um apanhado de abordagens e aplicações. <i>Luiz Eduardo Lobo e Silva (IC), Milena Candaten (IC), Jaiane de Moraes Boton (PQ) - UFSM</i>
EDU 013	Turbidimetria na sala de aula: usando impressão 3D para tornar instrumentos acessíveis. <i>Eduardo da Costa Ilha (IC), Eloisa T. Elicker (IC), Tatiane de A. Maranhão (PQ), Santiago Francisco Yunes (PQ) - UFSC</i>
EDU 021	O acidente com Césio-137 em Goiânia como possibilidade para o Ensino de Radioatividade. <i>Alice Gaier Viario (PG), Alessandro Cury Soares (PQ), Bruno dos Santos Pastoriza (PQ) - UFPEL</i>
EDU 026	Os professores formadores e a mobilização do CDC de licenciandos em Química. <i>Charlene Barbosa de Paula (PG), Tavane da Silva Rodrigues (PG), Bruno dos Santos Pastoriza (PQ), Fábio André Sangiogo (PQ) - UFPEL</i>

Sessão de Pôsteres

EDU 002	Química Forense: Uma promissora ferramenta de ensino e aprendizagem. Caroline Ieque Silveira (IC), Gabrielly Quartieri Sejanos (IC), Carina Machado Lima (IC), Victoria Borges Vaz De Leon (IC), Samuel Alves Pereira (IC), Taís Poletti (PG), Claudio Martin Pereira De Pereira (PQ) - UFPEL
EDU 004	A produção do sabão como prática educacional na disciplina de Química Analítica do Ensino Médio Técnico. Fernanda Gomes Wierzba (IC), Cibeli May O. Villalba (FM), Elias da Costa, Patricia Los Weinert (PQ), Luciana de Boer Pinheiro de Souza (PQ) – UEPG
EDU 005	Desafios e possibilidades da experimentação no Ensino de Química, na Educação Básica. Daniele Z. Valim (IC), Jaqueline Ritter (PQ) - FURG
EDU 006	Percepções de graduandos acerca do ensino de química em ações do Projeto QuiCo. Guilherme Brahm dos Santos (IC), Júlia Collares dos Santos (IC), Aline Joana R. Wohlmuth A. dos Santos (PQ) - UFPEL
EDU 009	Divulgação científica da Química do Cotidiano em espaços não formais de ensino. Maria Eduarda Lopes Gomes (IC), Isabelle Fernandes dos Passos (IC), Alessandro Cury Soares (PQ), Aline Joana R. Wohlmuth A. dos Santos (PQ) - UFPEL
EDU 010	Ações de extensão universitária do projeto Transfere no ensino de química. Amanda Batista Aguiar (IC), Guilherme Brahm dos Santos (PG); Alessandro Cury Soares (PQ), Aline Joana R. Wohlmuth A. dos Santos (PQ) - UFPEL
EDU 011	HQs de Química: Um método lúdico de aprendizagem. Heloyse Vitória S. Czarnieski (IC), Laira Raissa K. Paré (IC), Jaqueline Keller (PG), Sonia de Fátima Ribeiro (PG) - Colégio Estadual Santa Clara (Candói-PR)
EDU 012	Aprendizado de Soluções Químicas através de HQs. Caroline Valomin de Lima (IC), Emilly Caroina kwiatkowski (IC), Sônia de Fátima Ribeiro (PG), Jaqueline Keller (PG) - Colégio Estadual Santa Clara (Candói-PR)
EDU 014	Terrário como oficina lúdica no ensino aprendizagem de química. Beatriz Fernanda Da Silva (IC), Morgana Sofia Zilse (FM), Keysy Solange Nogueira (PQ) - UFSC
EDU 015	Tutoria entre pares: Principais dificuldades na aprendizagem de química enfrentadas por alunos de graduação da UFSM. Matheus Gass Lopes (IC), Eliane Cristina Amoretti (TC), Sailer Santos dos Santos (PQ) - UFSM
EDU 016	A importância do mapeamento do Perfil Epistemológico na formação de professores. Fernanda Karolaine Dutra da Silva (PG), Vitória Schiavon da Silva (PG), Bruno dos Santos Pastoriza (PQ), Alessandro Cury Soares (PQ) - UFPEL
EDU 017	Apoio Educacional Especializado de Química: planejamentos acerca do Desenho Universal para a Aprendizagem. Eduarda Vieira de Souza (PG), Fernanda Jardim Dias da Piedade (PG), Ângela Brum Soares (FM), Bruno dos Santos Pastoriza (PQ) - UFPEL

EDU 018	<i>O Átomo e a Molécula: uma discussão central sobre as Ligações Químicas de Lewis.</i> Vitória Schiavon da Silva (PG), Fernanda Karolaine Dutra da Silva (PG), Bruno dos Santos Pastoriza (PQ), Alessandro Cury Soares (PQ) - UFPEL
EDU 019	<i>Uma aula sobre vidrarias e medição de volumes: articulando a temática de Gênero, Química e Arte</i> Jamilly da Silva dos Anjos (IC), Nátali Alves (IC), Diogo La Rosa Novo (PQ), William Boschetti (PQ), Bruna Adriane Fary (PQ) - UFPEL
EDU 020	<i>Júri simulado sobre a utilização de embalagens biodegradáveis no ensino médio.</i> Tavane da Silva Rodrigues (PG); Charlene Barbosa de Paula (PG); Fábio André Sangiogo (PQ) - UFPEL
EDU 023	<i>Revolução no ensino do efeito indutivo: Técnicas e estratégias para o ensino médio.</i> Eduardo Lopes Silva (PQ/FM/PG), Marcelo Vieira Migliorini (PQ) - UERGS
EDU 024	<i>Ciência Forense e Egito Antigo: Uma proposta de sequência didática para o ensino médio.</i> Jeison Petersen (IC), Morgana Zilse (FM), Keysy Nogueira (PQ) - FURB
EDU 025	<i>Série de cinema “SCI Orgânica” como instrumento de aprendizagem.</i> Nicolas M. M. Barreto (IC), Camilly C. S. da Luz (IC), Carla R. Eising (IC), Natacha N. Biaotobock (IC), Vanessa A. Matias (TC), Gabriel J. Serpa (PQ), Albertina X. da R. Corrêa (PQ) – UNIVALI
EDU 028	<i>PLATAFORMA WHATSCHEM?</i> Maria Eduarda W. Rosa (PID), Pedro Leardin (PG), Cecília D. Flores (PQ), Marisa Tsao (PQ), Vanusa R. Lando (PQ) - UFCSPA
EDU 030	<i>Júri Simulado com base em uma Questão Sociocientífica sobre o uso da Energia Nuclear como alternativa para amenizar o aquecimento global.</i> Théo Lahorgue Roscoff (IC), Fábio André Sangiogo (PQ) - UFPEL
EDU 031	<i>Movimento de inserção da inovação em química no contexto escolar.</i> Paola Bork Abib (PG), Flávia Moura de Freitas (PG), Fábio André Sangiogo (PQ) - UFPEL
EDU 033	<i>Um xampu neutro é o melhor para os cabelos? Análise de uma proposta experimental para o ensino de Química.</i> Emily Karine dos Santos Silva (IC), Valdecir da Silva Junior (IC), Fabiele Cristiane Dias Broietti (PQ) - UEL
EDU 034	<i>Relato de aula investigativa para ensino de química: “Investigando como tirar óleo do mar”.</i> Júlia Bonow Haertel Barneche (IC), Natália Maiquele Dalamann Maron (IC), Bruna Adriane Fary (PQ), Diogo La Rosa Novo (PQ) - UFPEL
EDU 035	<i>A Inovação Científica e Tecnológica na Formação de Profissionais em Química.</i> Flávia Moura de Freitas (PG), Paola Bork Abib (PG), Fábio André Sangiogo (PQ) - UFPEL
EDU 036	<i>Um olhar para a Ciência através dos Textos de Divulgação Científica.</i> Bruna Gabriele Eichholz Vieira (PG), Roger Bruno de Mendonça (IC), Alessandro Cury Soares (PQ), Bruno dos Santos Pastoriza (PQ) - UFPEL
EDU 037	<i>Arte e o Ensino de Química: potencialidades e perspectivas para a valorização das artistas pelotenses.</i> Muriel Belo Pereira (PG), Bruna Adriane Fary (PQ) - UFPEL

Desenvolvimento de uma tabela periódica 3D acessível para a promoção da educação inclusiva em química

Lucas Gonçalves¹(IC)*, Matheus M. Camargo¹(IC), Ana Luisa M. Mesquita¹(IC), Ana Paula Dalsenter¹(IC), Beatriz Fernanda da Silva¹(IC), Fabiana S. Corrêa¹(PQ). *l.goncalves.lucas@grad.ufsc.br*

¹Universidade Federal de Santa Catarina – Campus Blumenau

Palavras Chave: Tabela periódica, Acessibilidade, Inclusão no ensino, Ensino de química, Educação especial.

Introdução

A busca pela educação inclusiva tem se tornado cada vez mais relevante para garantir a igualdade de oportunidades no sistema educacional. No contexto do ensino de química, a adaptação de recursos para alunos com deficiências visuais e auditivas assume um papel fundamental para promover a acessibilidade e a participação plena desses estudantes. O trabalho objetivou a criação de uma tabela periódica com acessibilidades inovadoras, adaptando o máximo de detalhes da tabela periódica com o propósito de proporcionar uma educação inclusiva e de alta qualidade para todos os alunos, independentemente de suas necessidades especiais. São enfatizadas as significativas contribuições de pesquisadores, como Brito (2006), cujo trabalho resultou em uma tabela periódica em alto relevo e braile, e Franco-Patrocínio et al. (2017), que desenvolveram uma tabela que contempla informações em braile e caracteres alfanuméricos, beneficiando tanto estudantes cegos e com baixa visão como estudantes videntes. Além disso, a utilização de desenhos universais de aprendizagem permite que alunos com transtorno do espectro autista também sejam beneficiados no ensino da química através do projeto. Essas abordagens inovadoras buscam superar as barreiras educacionais e criar um ambiente inclusivo, onde a diversidade seja valorizada e todos os alunos tenham a oportunidade de desenvolver plenamente suas habilidades e potenciais.

Resultados e discussão

Apresentou-se a concepção e desenvolvimento de uma tabela periódica 3D acessível, especialmente projetada para proporcionar uma experiência de aprendizagem inclusiva e engajadora para alunos com deficiência visual, auditiva e autismo no contexto do ensino de química. A metodologia adotada neste trabalho envolveu a confecção de uma representação da tabela periódica por meio de cubos de madeira individuais, cada um deles correspondente a um elemento específico. Cada cubo contendo informações, tais como

o nome do elemento, sua sigla, uma representação visual em Língua Brasileira de Sinais (LIBRAS), seu nome em Braille, número atômico e número de massa. A concepção dos layouts foi produzida na plataforma Canva, seguida pela impressão e fixação nas faces dos cubos de madeira. Os QRcodes para acesso à audiodescrição foram realçados com cola 3D. Após a etapa de envernização, a inclusão do nome em Braille em folha de acetato finalizou o processo. As ilustrações explicativas informando a classe, estado físico e utilização do elemento, juntamente com todas as acessibilidades mencionadas permitiu uma exploração mais acessível dos elementos e suas propriedades químicas por parte dos estudantes com deficiência. Além disso, a natureza manipulável da tabela periódica 3D possibilita uma interação tátil direta, enriquecendo a experiência de aprendizado dos alunos.

Conclusões

Os resultados preliminares apontam que uma abordagem inclusiva deve ser promissora ao permitir maior engajamento e interesse dos alunos com deficiência durante as aulas de química, contribuindo para uma aprendizagem com equidade e qualidade.

Agradecimentos

Aos 22 colaboradores do projeto da disciplina de Educação especial turma 23.1 e a UFSC Blumenau.

Referencias e notas

- (1) BRITO, L. G. F. A tabela periódica: um recurso para a inclusão de alunos deficientes visuais nas aulas de Química. Dissertação (Mestrado) – UFRN, Natal, **2006**.
- (2) FRANCO-PATROCÍNIO, S *et al.* Um modelo tátil da tabela periódica: o ensino de química para alunos cegos num contexto inclusivo. XI ENPEC, Florianópolis, **2017**.

QUÍMICA FORENSE: UMA PROMISSORA FERRAMENTA DE ENSINO E APRENDIZAGEM

Caroline Ieque Silveira¹(IC)*, Gabrielly Quartieri Sejanos¹ (IC), Carina Machado Lima¹ (IC), Victoria Borges Vaz De Leon¹ (IC), Samuel Alves Pereira¹ (IC), Taís Poletti¹ (PG), Claudio Martin Pereira De Pereira¹ (PQ).

¹Universidade Federal de Pelotas (UFPel), Pelotas-RS; iequesilveira@gmail.com

Palavras Chave: Química Forense, Contextualização, Ensino Médio, Educação, Universidade.

Introdução

O ensino tradicional muitas vezes se baseia em abordagens que podem parecer abstratas e desconectadas da vida real. No ensino de química, por exemplo, é necessário a utilização de fórmulas, tabelas periódicas e reações químicas, o que podem ser intimidantes para os adolescentes e, conseqüentemente dificultar o aprendizado¹. No entanto, a química é uma ciência fascinante que pode ser contextualizada de maneira envolvente e cativante, especialmente quando se aplica abordagens do cotidiano. A Química Forense é um exemplo da aplicação da química no contexto da investigação criminal, sendo um assunto que desperta a curiosidade da maioria dos adolescentes. Deste modo, ao contextualizar a química forense para alunos do ensino médio, pode-se demonstrar como a química está profundamente envolvida na resolução de crimes e justiça². Nesse sentido, o objetivo desse trabalho é despertar o interesse dos estudantes pelo estudo da química através da aplicação de atividades experimentais no âmbito da química forense, além de diminuir a distância entre universidade e escola.

Resultados e discussão

Desenvolveu-se três experimentos relacionados à Química Forense, tais como: teste colorimétrico de bafômetro usando solução de dicromato de potássio; identificação de sangue utilizando o teste colorimétrico de Kastle-Meyer; e revelações de impressões digitais latentes usando métodos de iodo, ninidrina e a técnica do pó. Essas práticas foram aplicadas para 4 classes do ensino médio do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Sul-rio-grandense (IF-Sul) do Campus de Pelotas-RS. Durante as atividades, foi observado que os alunos estavam curiosos e empolgados para se envolver nas práticas. Eles participaram ativamente em todos os experimentos e demonstraram, através de perguntas e curiosidades, um alto nível de interesse e entusiasmo pela química forense. A oportunidade de coletar, analisar e interpretar evidências envolvendo o conhecimento de química, como, por exemplo, na detecção de álcool por teste colorimétrico, na

identificação de sangue humano e nos diferentes métodos químicos e físicos aplicados em impressões digitais pareceu instigar e cativar os alunos. Além disso, pode-se observar a participação e integração de alunos com deficiência, todos estudantes conseguiram realizara as atividades. A **Figura 1** exemplifica a participação, o interesse e o conhecimento em química adquirido pelos alunos nos experimentos realizados.



Figura 1. Aplicação de técnicas de química forense.

Conclusões

Conclui-se que a contextualização da química forense para alunos do ensino médio é um modo eficaz de envolvê-los no estudo e na compreensão da química, além disso, foi observado o interesse e a aproximação entre universidade e escola.

Agradecimentos

A UFPel, ao IF-Sul Campus Pelotas, a PREC e aos órgãos de fomentos CAPES, CNPq, FAPERGS e INCT.

Referencias

- (1) FERREIRA, L.H.; HARTWIG, D.R.; OLIVEIRA, R.C. Ensino Experimental de química: uma abordagem investigativa contextualizada. *Química Nova na Escola*, v. 32, n. 2, p. 101-106, **2010**.
- (2) OLIVEIRA, M. F. Química Forense: a utilização da química na pesquisa de vestígios de crime. *Química Nova na Escola*, v. 24, p. 13-15, **2006**.

Representatividade feminina, divulgação científica e inserção social a partir do PPGQTA: “Gurias na Ciência” – Ação nas escolas

Daniele Müller¹ (PG)*, Alessandra da Costa¹ (PG), Márcia Silveira² (TC), Emanuele Lessa¹ (PG), Juliane Silva¹ (PG), Tainá Saúgo² (PG), Bruna Silva¹ (IC), Jessica Mota¹ (IC), Adriana Neves¹ (PQ), Aline Dorneles¹ (PQ), Angelita Barcellos¹ (PQ), Luísa Reinheimer² (PG), Maura Peixoto² (PG), Fernanda Ludwig¹ (PG), Roseane D’Avila¹ (TC), Lisliane Kickofel¹ (PG), Rafael Brinkerhoff¹ (TC), Vânia de Lima (PQ) *dgomesmuller@gmail.com

¹Av. Itália, km 8, bairro Carreiros, Rio Grande, RS. CEP: 96203-900 – Campus Carreiros

²Rua Coronel Francisco Borges de Lima, 3005, bairro Bom Princípio, Santo Antônio da Patrulha, RS. CEP: 95500-000

Palavras Chave: *Ciência, Mulheres, Representatividade, Inclusão, Divulgação.*

Introdução

Em junho de 2022 tiveram início, durante a celebração dos 15 anos do Programa de Pós-Graduação em Química Tecnológica e Ambiental (PPGQTA) da FURG, atividades associadas às mulheres cientistas atuantes neste Programa. Dessa forma, foi formado um coletivo composto por mulheres docentes, discentes e técnicas, além de cientistas homens, a fim de divulgar o trabalho, desafios e estratégias de mulheres cientistas de repercussão mundial e local para dois Campi da FURG (RG e SAP). Com o desenvolvimento dessas atividades surgiu o Projeto de Extensão denominado “Representatividade Feminina, Divulgação Científica e Inserção Social a partir do PPGQTA: Gurias na Ciência”. Dentre os objetivos do projeto são citados: 1) palestras em escolas sobre a história de cientistas mulheres e diversas com repercussão mundial; 2) elaboração, confecção e distribuição de cartilhas inclusivas didáticas sobre o trabalho e a história de cientistas locais atuantes em RG e SAP. Os resultados descritos no presente trabalho tornaram o projeto uma das referências para o estabelecimento de parcerias entre a rede pública de Ensino Médio/Fundamental de RG, SAP/arredores e a FURG.

Resultados e discussão

Ao total, treze escolas públicas foram visitadas, além de duas escolas privadas, dos municípios de RG, Gravataí, SAP e Osório, totalizando cerca de 1.500 alunos e cerca de 430 cartilhas distribuídas. Ao serem questionados frente à sua concepção de pessoas cientistas, a maior parte dos estudantes manifestava uma imagem relatada nos resultados de Chambers (1), como sendo a de um homem branco e idoso vestindo jaleco. A partir desse questionamento, mulheres cientistas estrangeiras/brasileiras, negras e brancas foram apresentadas nas escolas buscando correlação com a realidade da

comunidade-alvo. Através da distribuição das cartilhas, aproximou-se os contextos escolares da vida de cientistas locais, visto que muitas das integrantes do Projeto são advindas de escolas públicas e rurais. Por fim, falou-se em planos, objetivos, sonhos e apresentou-se a Universidade como uma alternativa. As escolas contempladas iniciaram e/ou finalizaram trabalhos, como os associados às disciplinas como Iniciação Científica e Projeto de Vida com as apresentações do grupo de trabalho.



Figura 1. Capa da cartilha inclusiva distribuída nas escolas de RG e SAP.

Conclusões

O projeto, suas ações e resultados, têm sido amplamente divulgados e a interação com o público-alvo fortalecida. A partir das discussões sobre Ciência, desafios e estratégias realizados por cientistas mulheres o projeto está ampliando a representatividade feminina em seus campos de estudo e trabalho.

Agradecimentos

A todas as escolas que abriram suas portas e permitiram a fala sobre mulheres na Ciência.

Referências e notas

- (1) Chambers, David. *Science Education* **1983**, 67(2), 255-265

A PRODUÇÃO DO SABÃO COMO PRÁTICA EDUCACIONAL NA DISCIPLINA DE QUÍMICA ANALÍTICA DO ENSINO MÉDIO TÉCNICO

Fernanda Gomes Wierzba¹ (IC), Cibeli May O. Villalba² (FM), Elias da Costa¹ (PQ), Patricia Los Weinert¹ (PQ), Luciana de Boer Pinheiro de Souza¹ (PQ)*.lbpsouza@uepg.br

¹Departamento de Química, Universidade Estadual de Ponta Grossa (UEPG), Ponta Grossa - PR.

²Colégio Estadual Prof. João Ricardo von Borell du Vernay, Ponta Grossa - PR.

Palavras Chave: Educação Ambiental, Mapa Mental, Produção de Sabão.

Introdução

Um dos grandes poluidores de água potável, solo, rios e nascentes é o resíduo do óleo proveniente de frituras. Esse resíduo contabiliza mais de duzentos milhões de litros que, por mês, acabam sendo despejados em rios e lagos. Embora esse óleo represente uma porcentagem ínfima do lixo, o seu impacto ambiental é muito grande (1). A Educação Ambiental começou a ser implantada em escolas a fim de conscientizar os alunos e a população para boas práticas com o meio ambiente. A produção de sabão caseiro, além de evitar que esse resíduo seja descartado de forma incorreta, também pode gerar uma renda extra. Além disso, é possível aprofundar alguns conteúdos da disciplina de Química com testes relacionados a qualidade do produto (2).

Neste trabalho, a educação ambiental foi abordada nas aulas de Química Analítica, para duas turmas do 2º ano do Ensino Médio Técnico de um Colégio Estadual do Município de Ponta Grossa, usando como tema a preparação de sabão a partir do óleo residual de cozinha.

Resultados e discussão

O projeto foi desenvolvido durante o período de Estágio Supervisionado III do curso de Licenciatura em Química da UEPG, e seguiu a seguinte sequência didática: 1. Elaboração de mapa mental pelos alunos e primeiros conceitos da Educação Ambiental; 2. Aula expositiva e dialogada sobre problemas ambientais que o óleo de cozinha causa na natureza; 3. Aula de produção de sabão como alternativa de reaproveitamento do óleo; 4. Aula prática de testes relacionados a qualidade do produto (ensaios organolépticos, resistência a água, formação de espuma, determinação de pH); 5. Organização do conhecimento e produção de mapas mentais dos alunos.

A fabricação de sabão foi uma forma de aplicação da Educação Ambiental e, por meio dela, foi possível apresentar aos alunos as técnicas aplicadas a disciplina de Química Analítica, os quais são muito

necessários para se obter um produtos com melhor qualidade, como por exemplo: ensaios organolépticos, resistência a água, formação de espuma, determinação de pH.

A produção de Mapas Mentais foi fundamental para o acompanhamento do conhecimento adquirido pelos alunos durante a aplicação do projeto. A evolução dos alunos pode ser vista na Figura 1.

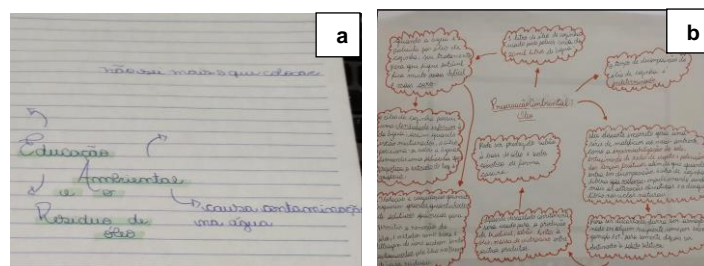


Figura 1. Mapa Mental de um grupo de alunos desenvolvido (a) no primeiro dia de aplicação do projeto e (b) no último dia de aplicação do projeto.

Conclusões

No decorrer do desenvolvimento do projeto, além da aplicação de técnicas analíticas para análise de qualidade do sabão produzido pelos alunos, foi possível observar um avanço dos conceitos relacionados a produção de sabão e educação ambiental pela análise dos Mapas Mentais.

Agradecimentos

Universidade Estadual de Ponta Grossa

Referências e notas

(1) ECÓLEO -. Disponível em: <<https://ecoleo.org.br/>>. Acesso em: 13 de setembro de 2023.

(2) Tescarollo, I. L.; Junior, J. P. M.; Amâncio, M. S.; Alves, T. F.T. *Revista Eletrônica em Gestão, Educação e Tecnologia Ambiental*, 2015, 871-880.

Desafios e possibilidades da experimentação no Ensino de Química, na Educação Básica

Daniele Z. Valim¹ (IC)*, Jaqueline Ritter¹ (PQ). danizarnottvalim@gmail.com

¹FURG – Universidade Federal do Rio Grande, campus Carreiros.

Palavras Chave: Experimentação e Capacidades, Ensino Médio, Dificuldades com a experimentação, Formação de professores.

Introdução

A experimentação no ensino de Química é uma temática de fundamental importância para minimizar a distância entre os campos teórico e prático. Neste âmbito, objetivou-se compreender melhor as condições, as possibilidades, o potencial da experimentação e bem como estes experimentos influenciam na produção de conhecimentos e significados no processo de ensino e aprendizagem de estudantes do Novo Ensino Médio. Para tal, fez-se uma revisão sistemática de literatura no Portal Capes Periódicos, a fim de responder os seguintes problemas de pesquisa: Qual a importância e desafios da experimentação para a produção de significados à Química no Ensino Médio?

Resultados e discussão

Ao inserir os seguintes termos de busca: experimentação, ensino médio e química, foram obtidos 16 artigos em português e revisados por pares nos últimos 5 anos, até o momento. O corpus, contendo estes artigos foram analisados segundo a metodologia de Análise Textual Discursiva, de Moraes (2003). Deste total, 10 artigos foram excluídos da análise, embora apresentassem os critérios definidos pelos termos de busca, não apresentavam no corpo do texto, questões que se relacionavam aos objetivos desse estudo. Dos 6 artigos utilizados na análise, produziu-se três categorias emergentes, nomeadas como: *Experimentação para o desenvolvimento de capacidades*, *Dificuldades com a experimentação* e *A experimentação na formação*.

Os artigos da categoria *Experimentação para o desenvolvimento de capacidades*, afirmam que a observação da prática trabalhada de forma dialética com a teoria, contribui para que os estudantes tirem suas próprias conclusões e exercitem a interpretação sobre a temática, problemática ou fenômeno na relação com os conceitos abordados, dando margem a discussão (3). Além de tornar o ensino mais eficaz por ampliar suas capacidades cognitivas, empregando metodologias que permitam ao estudante ser protagonista na construção de seu conhecimento, suprimindo assim algumas dificuldades na compreensão dos conceitos científicos. Já os artigos da categoria *Dificuldades com a Experimentação* baseiam-se em relatos de professores os quais enfrentam dificuldades para tornar a aula experimental rotineira ou mais frequente. Dentre estes

fatores estão a redução da carga horária semanal, turmas numerosas e a falta de tempo para a organização do material ao final da prática (3). Diante disso, é comum que optem por aulas teóricas e em sala. Por fim, os artigos da categoria *Experimentação na Formação* apontam problemáticas associadas a graduação, em que as disciplinas experimentais tem maior parte do foco na pesquisa, sendo pouco voltadas para as necessidades dos futuros licenciandos.

Conclusões

A abordagem experimental como contextualização dos conteúdos, no ensino de química, deve ser exercida concomitantemente com a teoria de modo que uma complemente a outra. Igualmente, também é necessário reconhecer as condições em que se encontram os professores na escola, nem sempre favoráveis a execução de atividades experimentais como evidenciou a categoria 2. Contudo, independente da metodologia adotada e/ou condições de execução, espera-se que os cursos de formação de professores priorizem a compreensão dos fenômenos químicos interpretados e voltados para a Educação Básica e ao interesse pela ciência/Química.

Agradecimentos

EQA/FURG

Referências e notas

- (1) MORAES, R. Uma tempestade de luz: a compreensão possibilitada pela análise textual discursiva. *Ciência & Educação* (Bauru), v. 9, n. 2, p. 191–211, 2003.
- (2) TAMIOSSO, R. T.; DA LUZ, F. M.; DA COSTA, D. K.; PIGATTO, A. G. S. Expectativas de estudantes da educação básica quanto a utilização do laboratório de Ciências. *Revista Thema*, Pelotas, v. 16, n. 4, p. 956–968, 2020. DOI: 10.15536/thema.V16.2019.956-968.1584.
- (3) ROTTA, J. C. G.; ARAÚJO, C. N.; BEZERRA, F. E. M. Influência da formação inicial docente na experimentação na sala de aula de Ciências e Química. *Revista Thema*, Pelotas, v. 17, n. 4, p. 912–923, 2021.

Percepções de graduandos acerca do ensino de química em ações do Projeto QuiCo

Guilherme Brahm dos Santos*¹ (IC), Júlia Collares dos Santos² (IC), Aline Joana Rolina Wohlmuth Alves dos Santos³ (PQ). guilhermebrahm@hotmail.com

¹Universidade Federal de Pelotas, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos - CCQFA, Programa de Pós Graduação em Química.

²UFPEL, CCQFA, Curso de Bacharelado em Química Forense.

³UFPEL, CCQFA.

Palavras Chave: Divulgação científica, Comunicação, Cotidiano, Química.

Introdução

O projeto de ensino QuiCo – Estratégias de ensino e aprendizagem na química do cotidiano, atua juntamente com os projetos de extensão Transfere e TICs, no âmbito da Universidade Federal de Pelotas (UFPEL) pela promoção de uma cultura em Química, por meio de ações de ensino¹, com foco em qualificação de futuros profissionais da área. Nosso grupo é composto por graduandos, bolsistas e voluntários, professores universitários. Com base nisso, este trabalho objetivou entender as percepções dos graduandos em relação à sua participação em dois eventos ocorridos na cidade de Pelotas-RS, no ano de 2023, onde foram realizados experimentos sobre conceitos de potencial hidrogeniônico (pH) e densidade de líquidos, que relacionaram química e cotidiano.

Resultados e discussão

Os eventos da Fenadoce (Feira Nacional do Doce) e Mundo UFPEL são eventos abertos direcionados para o público em geral, por isso, os graduandos do grupo necessitaram adaptações em relação às suas falas e abordagens, para merecer a empatia do público e estabelecer uma "relação pedagógica" que visa à construção de significados, no caso em específico a relação que desejou-se fora a de divulgar a química. Após cada evento, o grupo formado por 7 graduandos que compõem o grupo de trabalho dos projetos (Transfere, TICs e QuiCo) preencheu a um questionário, sendo que as respostas foram analisadas por metodologia qualitativa-quantitativa³. A Figura 1 evidencia as respostas à questão 1 "Como você avalia que sua interação com o público contribuiu para a experiência de formação do seu conhecimento?" e, trazem à tona, a experiência de formação do conhecimento, onde alguns dos graduandos associaram sua interação com o público a uma forma

de relação uma percepção de "ensino", outros associaram a interação como uma forma de comunicação e os demais relacionaram a interação à necessidade de adequação das explicações conforme a demanda individual de cada pessoa assistida. As respostas à questão 2 "Alguma pergunta do público lhe causou insegurança? Qual?", não destacam perguntas, mas sim situações que causaram insegurança e hesitação aos graduandos, em conversar com a diversidade de participantes e, porventura, repassar algum conceito de forma equivocada.



Figura 1. Respostas à questão 1.

Conclusões

O principal aprendizado do grupo foi em relação à necessidade de preparação prévia e estudo do tema, para adquirir confiança e domínio sobre as explicações ao público diverso e garantir a qualidade das ações, da mesma maneira como ocorre no caso de apresentações em ambientes profissionais de trabalho.

Agradecimentos

CAPES, CNPQ, PRE e PREC - UFPEL.

Referencias e notas

- (1) Santos, A. J. R. W. A. et al. *Brajets*, **2023**, 16(1), 59.
- (2) Scott, P; Mortimer, E; Ametller, J. *Stud Sci Educ*, **2011**, 47(1), 3.
- (3) Bardin, L. *Análise de conteúdo*. SP: Martins Fontes, **1977**.

Ensino de química e desenvolvimento sustentável: um apanhado de abordagens e aplicações

Luiz Eduardo Lobo e Silva¹ (IC)*, Milena Candaten¹ (IC), Jaiane de Moraes Boton¹ (PQ), eduardo.lobo@acad.ufsm.br

¹Universidade Federal de Santa Maria – Campus Santa Maria.

Palavras Chave: Química verde, Ensino de química, Desenvolvimento sustentável.

Introdução

O desenvolvimento da sociedade trouxe, como consequência, problemas ambientais que afetam diretamente toda a biosfera. Em razão disso, líderes mundiais reúnem-se para buscar e propor alternativas que viabilizem o desenvolvimento social alinhado à sustentabilidade, como, por exemplo, a Agenda 2030, que propõe um plano global com 17 Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS)¹. Por conseguinte, a área da Química Verde vem sendo amplamente difundida e comentada por abordar o tema, principalmente no cenário da pesquisa e processos industriais. Além disso, a inserção da educação ambiental nas instituições de ensino surgiu como um meio de elucidar a sociedade sobre o agravamento dos problemas ambientais e formar cidadãos críticos, capazes de identificar e combater os problemas presentes em suas comunidades². Nesse sentido, o presente trabalho tem como objetivo analisar trabalhos desenvolvidos com foco no ensino de química para o desenvolvimento sustentável.

Resultados e discussão

Durante o levantamento de artigos publicados, foi encontrado um número especial da revista Química Nova na Escola (QNEsc), publicado em 2022, voltado para o ensino de química para o desenvolvimento sustentável. Foram encontrados 16 artigos, os quais foram lidos para posterior análise das abordagens e aplicações apresentadas. Os trabalhos foram divididos em quatro categorias: química verde, contextualização no ensino de química, contextualização com a agricultura e reciclagem e fontes de energia renováveis. Dos estudos encontrados, dois ressaltavam a importância da inclusão da Química Verde na formação de profissionais da Química. Enquanto outros dois salientavam a criação de ambientes virtuais para reduzir riscos experimentais e o uso de tecnologias, como o Moodle, para abordar e promover a Química Verde.

Temos um exemplo de contextualização do ensino, relacionando a Química com questões sobre água e a preservação de mangues.

A abordagem crítica também é evidenciada, com discussões sobre o antropoceno e os ODS em três artigos.

Quatro estudos abordaram os agrotóxicos, promovendo a conscientização sobre questões ambientais e sustentabilidade, contextualizando a agricultura e o meio ambiente. Por último, quatro artigos demonstravam uma variedade de abordagens que integrassem a Educação Ambiental e a sustentabilidade em contextos educacionais, indo desde a conscientização sobre reciclagem até a promoção de fontes de energia limpa e o desenvolvimento do pensamento crítico e sustentável dos alunos.

Conclusões

A integração da Educação ambiental e sustentabilidade no ensino de Química, contribui de forma positiva para a Agenda 2030 e a preservação do meio ambiente, englobando todos os níveis de ensino. A abordagem interdisciplinar e contextualizada contribui para a formação de cidadãos conscientes e críticos, promovendo o pensamento científico e a responsabilidade ambiental, indo além da informação e incentivando a reflexão sobre o papel de cada indivíduo na preservação do planeta.

Agradecimentos

À professora Jaiane de Moraes Boton, que nos auxiliou no desenvolvimento deste trabalho.

Referencias e notas

- (1) ONU. **Transformando Nosso Mundo: A Agenda 2030 para o Desenvolvimento Sustentável**, Nova York, 2015.
- (2) BERALDO, D. et al. Educação ambiental em instituições públicas de ensino como estratégia para sustentabilidade. **Revista Insignare Scientia – RIS**, v. 5, n. 1, p.151-168, 16 mar. 2022.
- (3) **QUÍMICA NOVA NA ESCOLA**, São Paulo, v. 44, n.2, mai. 2022.

Mapeando a Contribuição das Mulheres na Ciência: Um Estudo Bibliográfico

Bruna Botelho Silva¹ (IC)*, Alessandra Gomes da Costa¹ (PG), Aline Machado Dorneles¹ (PQ).
botelhobrunab@gmail.com

Universidade Federal do Rio Grande (FURG) – Campus Carreiros.

Palavras Chave: *Mulheres na Ciência, Gênero, Educação.*

Introdução

A significativa participação das Mulheres na Ciência, apesar de suas contribuições serem frequentemente subvalorizadas, constitui um ponto de partida para destacar suas trajetórias, desafios e conquistas. Isto, serve de inspiração e encorajamento para outras mulheres seguirem carreiras científicas, promovendo a diversidade de perspectivas culturais, raciais e de conhecimento¹. Deste modo, o presente trabalho faz o uso do Mapeamento Sistemático (MS) como ferramenta para identificar e classificar dissertações relacionadas ao tema da pesquisa, Mulheres na Ciência, ampliando a compreensão do tema e identificando subáreas correlatas, permitindo a coleta e a sumarização de dados relevantes para o avanço do conhecimento científico² utilizando a plataforma Biblioteca Digital Brasileira de Teses e Dissertações.

Resultados e discussão

Para conduzir o MS procedeu-se uma busca avançada na Biblioteca Digital Brasileira de Teses, limitando a dissertações do período de 2018 à 2022. Utilizou-se como filtro as palavras-chave "Mulheres e Ciência", resultando em uma primeira seleção de 16 dissertações. Após, adotou-se os critérios de seleção e avaliação delineados por Felizardo *et al.* (2017)². A seleção foi refinada com base na afinidade com a linha de pesquisa da monografia, o que resultou na redução do conjunto para 6 dissertações. A partir dessas, originaram-se dois eixos temáticos: "Mulheres na Ciência", composto por 3 dissertações e "Gênero e Carreira Acadêmica", englobando 3 dissertações.

O eixo temático intitulado "Mulheres na Ciência" propõe uma análise aprofundada e crítica dos desafios enfrentados pelo sexo feminino ao longo de suas jornadas acadêmicas e científicas. Este enfoque não apenas examina as barreiras de gênero que se manifestam nesse percurso, mas também investiga de maneira abrangente a questão da representatividade das mulheres em diferentes domínios da pesquisa científica. Através dessa perspectiva, podemos obter uma compreensão mais completa dos obstáculos e

oportunidades que as mulheres enfrentam no contexto científico.

No segundo eixo temático "Gênero e Carreira Acadêmica", são abordadas questões relevantes sobre como o gênero influencia o progresso nas carreiras acadêmicas. Isso envolve a análise das desigualdades de gênero presentes nas instituições acadêmicas e seu impacto na representatividade das mulheres em posições de liderança e reconhecimento no meio acadêmico. Esse estudo contribui de maneira significativa para entender os desafios que as mulheres enfrentam ao avançar em suas carreiras acadêmicas e destaca questões cruciais que precisam ser enfrentadas para promover a igualdade de oportunidades e o empoderamento feminino.

Conclusões

Destaca-se a importância de reconhecer e abordar os desafios enfrentados pelas Mulheres na Ciência e nas carreiras acadêmicas. As trajetórias acadêmicas das mulheres frequentemente são marcadas por barreiras de gênero e desigualdades que afetam sua representatividade e progresso. Para promover a igualdade de gênero dentro da Ciência é essencial pesquisas que abordem essas questões de maneira abrangente e crítica, possibilitando a inspiração e encorajamento de mais mulheres a seguir essas carreiras, enriquecendo a diversidade de perspectivas.

Agradecimentos

Ao projeto de extensão do Programa de Pós-Graduação em Química Tecnológica e Ambiental da FURG "Representatividade Feminina, Divulgação da Ciência e Inserção Social a partir do PPGQA: Gurias Na Ciência" e a CAPES.

Referencias e notas

- (1) SILVA, M. Uma contribuição à História das Mulheres nas Ciências no Brasil: Heloísa Alberto Torres, a primeira Diretora do Museu Nacional/UFRJ. 2018.
- (2) FELIZARDO, K. R. *et al.* Revisão sistemática da literatura em engenharia de software: teoria e prática. Elsevier. 2017, 144.

Divulgação científica da Química do Cotidiano em espaços não formais de ensino

Maria Eduarda Lopes Gomes¹ (IC), Isabelle Fernandes dos Passos² (IC), Alessandro Cury Soares³ (PQ), Aline Joana Rolina Wohlmuth dos Santos (PQ). eduardal.gomes@outlook.com

^{1,2}Universidade Federal de Pelotas - UFPel, Centro de Ciências Químicas Farmacêuticas e de Alimentos - CCQFA, curso de Química Forense

^{3,4}UFPel, CCQFA

Palavras Chave: *experimentação, potencial hidrogeniônico, material didático*

Introdução

O projeto de extensão universitária TICs - Tecnologias de Informação e Comunicação na Química objetiva a formação de professores, profissionais da área da química e estudantes em relação ao uso de tecnologias que possam contribuir nos processos de ensino e aprendizagem¹, associadas à experimentação. Esta articulação desperta forte interesse entre alunos de diversos níveis de escolarização². Seguindo este pensamento, um experimento voltado ao conteúdo de potencial hidrogeniônico (pH) foi disponibilizado ao público visitante de dois eventos ocorridos na cidade de Pelotas-RS, em 2023. Material didático foi preparado com uso de TIC para atender aos visitantes da Feira Nacional do Doce (Fenadoce) e da Mostra UFPel. Desta forma, o presente trabalho teve como objetivo propor uma ação de divulgação científica, associando Química e Cotidiano, em espaços não formais de ensino e, após, as percepções do público atendido foram analisadas com base nas respostas a um formulário, em cada um dos eventos.

Resultados e discussão

A equipe era composta por 7 graduandos dos cursos de Química da UFPel e professores universitários. Os materiais teóricos e experimentais foram pensados para serem atrativos, enfatizando a avaliação de pH com uso de indicadores. Foram utilizadas amostras de água mineral com e sem gás. Um questionário, contendo 6 perguntas fechadas e 1 aberta, foi respondido pelos participantes, com idades de 12 a 56 anos. Ao total foram 24 respostas, sendo que 15 pessoas participaram da ação que teve duração de 2h na Fenadoce no dia 16/06 e 9 pessoas participaram do evento Mundo UFPel, que teve duração de 4h no dia 17/06. Os eventos apresentavam focos bem diferentes, sendo o primeiro voltado ao turismo, entretenimento e comércio e, o segundo, ao ensino, promoção dos cursos e dos espaços da universidade. A maioria do

público indicou como grau de escolaridade, ensino médio. Foi nítida a empolgação dos participantes ao realizar o experimento prático. Os dados dos questionários foram coletados e analisados por metodologia qualitativa-quantitativa³. A pergunta principal foi “O que você aprendeu com a oficina de pH?”, sendo que 13 respostas indicaram “Sobre indicadores de pH” e 16 indicaram “Indicadores mudam de cor em pHs diferentes”. Dentre estas respostas, 8 e 9 pessoas, respectivamente, marcaram ensino médio como seu grau de escolaridade. Foi possível interagir com pessoas diversas, onde a curiosidade foi explorada e as dúvidas e questionamentos foram respondidos de forma sucinta e clara. Independente da idade, os participantes atuaram ativamente nas ações propostas, para a oficina, em cada um dos eventos.

Conclusões

O tema de potencial hidrogeniônico foi discutido à medida que foi sendo questionado com o público e com seu cotidiano, a fim de tornar a assimilação de conceitos mais significativa. O grupo também obteve crescimento no sentido do exercício de abordagem e de falas em público, usando explicações simplificadas e objetivas aos fenômenos observados. Desta forma, divulgação científica, em universos plurais, tais como espaços não formais de ensino, foi realizada e obteve resposta positiva por parte do público.

Agradecimentos

PRE / PREC / UFPel

Referências e notas

- (1) Santos, A. J. R. A. et al. *Tecnologias de Informação e Comunicação: pesquisas em inovações tecnológicas*, 2021, 14, 170.
- (2) Giordan, M. *QNEsc*. 1999, 10, 43.
- (3) Flick, U. *Introdução à Pesquisa Qualitativa* 2009, 03, 39.

Ações de extensão universitária do projeto Transfere no ensino de química

Amanda Batista Aguiar^{1*} (IC), Guilherme Brahm dos Santos² (PG); Alessandro Cury Soares³ (PQ), Aline Joana Rolina Wohlmuth dos Santos⁴ (PQ). b.amandaaguiar@gmail.com

¹Universidade Federal de Pelotas - UFPel, Centro de Ciências Químicas Farmacêuticas e de Alimentos - CCQFA, curso de Química Forense

²UFPel, CCQFA, Programa de Pós-Graduação em Química - PPGQ

^{3,4}UFPel, CCQFA

Palavras Chave: Instagram, Facebook, Espaços formais e não formais, Cotidiano.

Introdução

A química é uma área reconhecida por mobilizar elementos conceituais e ideias abstratas¹. Em virtude disso, o projeto Transfere – Mediação de Conhecimentos Químicos entre Universidade e Comunidades, atua na extensão universitária desde 2011, buscando a promoção, divulgação científica e pluralização dos conceitos da química². Suas ações tem foco em tornar conceitos químicos mais acessíveis às diversas comunidades. O projeto reconhece a complexidade dos conceitos e tenta aproximá-los do cotidiano das comunidades, em espaços formais e não formais de ensino. As ações transcorrem em plataformas virtuais, como Instagram e Facebook, por meio do perfil @projetotransfere³, bem como em espaços presenciais, como eventos, feiras e escolas. Em cada ambiente é proposta uma ação com materiais coloridos e chamativos para atrair o público presente e incentivar a curiosidade pela química. O objetivo deste trabalho foi relatar ações de divulgação do projeto Transfere, no incentivo dos saberes de química relacionados ao cotidiano de comunidades diversas, por meio de ações promovidas em dois eventos ocorridos na cidade de Pelotas-RS no ano de 2023.

Resultados e discussão

Nos eventos da Feira Nacional do Doce (Fenadoce) e na Mostra UFPel, ano de 2023, a equipe formada por graduandos, bolsistas e voluntários, e professores universitários atuou de modo a divulgar a inter-relação entre química e cotidiano. Para isso, conceitos de densidade e polaridade foram abordados por meio do experimento “Torre de Líquidos”, considerando a possibilidade de sua realização em bancada aberta, sem riscos à saúde dos participantes, contando com apelo visual e acessibilidade. O evento da UFPel era voltado ao público estudantil, enquanto o evento da Fenadoce era voltado para turistas, visitantes,

entretenimento e negócios. Cada participante respondeu a um questionário com 6 perguntas fechadas sobre o experimentos e 1 pergunta aberta sobre sugestões ou críticas. O número total de respostas foi: 15 originadas de participantes de ensino médio, 3 de graduação e 1 pessoa que não respondeu sobre nível de escolaridade. O método híbrido de análise qualitativo-quantitativo⁴ das respostas permitiu observar as percepções e experiências dos participantes em relação à assimilação do tema, ao mesmo tempo em que foi possível quantificar e mensurar aspectos específicos do desempenho do grupo. Em ambos os eventos, foi percebido um genuíno interesse do público. Diversas perguntas foram realizadas desde o conceito de densidade até mesmo sobre os cursos de ciências ofertados pela universidade.

Conclusões

A interação com o público proporcionou a mediação de conceitos de química presentes no cotidiano por meio da experimentação. A experiência vivida nestes eventos reforça a importância da divulgação científica em espaços diversos de ensino, sejam presenciais, virtuais, formais ou não formais.

Agradecimentos

PREC - PRE - UFPel

Referências e notas

- (1) Taber, K. S. *Foundations of Chemistry*, **2019**, 22, 309
- (2) Santos, A. J. R. W. A. et. al., *A Extensão Universitária nos 50 Anos da UFPel*, **2020**, 03, 781.
- (3) Santos, A. J. R. A. et al. *Tecnologias de Informação e Comunicação: pesquisas em inovações tecnológicas*, **2021**, 14, 170.
- (4) Flick, U. *Introdução à Pesquisa Qualitativa* **2009**, 03, 39.

HQs de Química: Um método lúdico de aprendizagem

Heloyse Vitória Sinhorin Czarnieski (IC), Laira Raissa Klukeskonski Paré (IC), Jaqueline Keller (PG), Sonia de Fátima Ribeiro (PG)* soni_ade_fatima@hotmail.com

Palavras Chave: Gibi, Educação, Ensino Médio, química.

Introdução

O pleno direito à cidadania está intrinsecamente ligado à educação, pois é por meio dela que o indivíduo é inserido na sociedade e é instigado a desenvolver o seu senso crítico. A medida que há uma identificação dos alunos com o conteúdo exposto, evidencia-se uma sinergia que favorece o processo de assimilação e retenção do conhecimento. Desse modo, é imprescindível que a abordagem dos conteúdos de Química seja feita de forma lúdica e cativante, afinal a Química está presente de maneira ubíqua em todas as esferas da vida e da tecnologia, oferecendo insights valiosos sobre a natureza da matéria e possibilitando o progresso humano em diversas áreas. Dessarte, o projeto para a elaboração de gibis com a temática que engloba diferentes áreas da Química, realizado pelos alunos, tem como objetivo estimular a aprendizagem significativa sobre a Química e seus diversos conteúdos, por meio das histórias em quadrinhos, uma metodologia prática e lúdica.

Resultados e discussão

A proposta pedagógica que consiste na criação de HQs baseadas na Química foi realizada com os 52 alunos do 3º ano do Ensino Médio, em um Colégio Estadual na cidade de Candói, Paraná. Foram desenvolvidas diversas histórias em quadrinhos, das quais se destacou: “João e Maria em: O mundo Mágico da Química” (figuras 1), devido ao seu enredo muito interessante e criativo, além de uma explanação detalhada e bem desenvolvida dos conteúdos de química. A HQ é inspirada na história de João e Maria, em que duas crianças se perdem e acabam na casa de uma bruxa. No entanto, ao contrário da narrativa original, os desafios que deverão ser enfrentados, para conseguir escapar da casa da bruxa estão relacionados a conteúdos de Química, mais especificamente à polaridade das moléculas químicas, à entalpia das reações e à dinâmica dos elétrons nos átomos. A partir da utilização de métodos de ensino que relacionam o conteúdo com situações do mundo real e incentivam os alunos a explorar conceitos por meio de experiências práticas, como as HQs de Química, permite a criação de um ambiente de aprendizagem que promove a compreensão profunda e mantém os alunos motivados. Portanto, percebe-se que não se “deve implicar na

separação da atividade experimental do processo de desenvolvimento teórico dos conceitos químicos pertinentes ao tema abordado, pois a teoria é um processo inerente à aprendizagem” (BEDIN, 2019, p. 113).



Figura 1. Capa da História em Quadrinhos

Conclusões

Enquanto a educação se limitar a uma educação científica tradicional e estritamente formal, a Química se apresentará de maneira distante e abstrata, dificultando a compreensão dos estudantes sobre a sua relevância e utilidade. Constata-se que após a efetivação das HQs de Química, os alunos demonstraram um aprendizado exponencial, além de despertar o interesse por outros conteúdos de Química. Os educandos tornaram-se mais participativos e obtiveram maior êxito em suas provas, o que os capacitou a assimilar e aplicar os princípios da Química em seu dia a dia com confiança e habilidade. A metodologia utilizada permitiu que os discentes internalizassem o conteúdo de maneira mais eficiente, exercendo a sua autonomia no ato de aprender.

Agradecimentos

Corpo Docente e Discente do Colégio Santa Clara.

Referencias e notas

- (1) Correia, J. J., Oliveira, W. C.; A definição de entalpia em livros didáticos. *Revista Binacional Brasil-Argentina: Diálogo Entre As Ciências*, 8(1), 327-353, 2019.
- (2) Friedrich, M. T.; Desenvolvimento e validação de método multirresíduo para determinação de agrotóxicos em trigo por LC-MS/MS e GC-MS/MS, Tese de Doutorado, UFSM, Programa de Pós Graduação em Química, Santa Maria – RS, 2014.
- (3) Tavares, A. P.; LÚCIA COSTA Amaral, C. L. C.; A utilização de histórias e quadrinhos no ensino de química: um mapeamento da produção científica nos enpec. Congresso Internacional de Educação e Tecnologias | Encontro de Pesquisadores em Educação a Distância, São Carlos - SP, 2020.
- (4) Konrad, C. J.; Bedin, E.; Experimentação no ensino de química e ostrês momentos pedagógicos: uma prática colaborativa de investigação, *Química: ensino, conceitos e fundamentos*, p 14-21, 2021.

Aprendizado de Soluções Químicas através de HQs:

Caroline Valomin de Lima (IC), Emilly Caroina kwiatkowski (IC), Sônia de Fátima Ribeiro (PG), Jaqueline Keller (PG),
* valomincaroline@gmail.com

Candói-PR

Escola Estadual Santa Clara. História em quadrinhos.

Introdução

A sala de aula é um lugar de aprendizagem, onde os alunos são apresentados à métodos convencionais, por tanto existe disciplinas desafiadoras como a química

Dessa forma, este estudo priorizou abordar os conceitos sobre Soluções, de forma a possibilitar aos alunos estabelecer relações de análise sobre os impactos da ciência e da tecnologia na sociedade, por meio de conexões com acontecimentos diários, promovendo assim, a sistematização dos conhecimentos químicos (Niezer 2012).

Um exemplo de ensino aprendizagem são as HQs (História em Quadrinhos), essa abordagem criativa pode ser uma maneira eficaz de cativar os alunos e despertar seu interesse pela química. Ao criar personagens e situações relacionadas aos conceitos químicos, os alunos são desafiados a pensar criticamente sobre como aplicar essas informações em contextos do mundo real. Eles podem explorar temas como soluções químicas, propriedades dos elementos, processos de laboratório e muito mais, tudo enquanto desenvolvem suas habilidades de escrita e desenho. Além disso, as HQs permitem que os alunos visualizem as informações de forma mais clara e envolvente, facilitando a compreensão e a retenção dos conceitos químicos

Resultados e discussão

O projeto "Aprendizado de Soluções Químicas através de HQs (História em Quadrinhos, proposto pela professora Sonia Ribeiro na turma da 3ª série, do Ensino Médio, realizada no Colégio Estadual Santa Clara, Candói Paraná, é um tipo de ensino eficaz em salas de aula, essa escolha de método não só torna o conteúdo mais tangível, mas também permite que os alunos explorem e compreendam as interações e reações de maneira única.

Imaginando um mundo de HQs onde formigas e outros insetos ganham vida como personagens engraçados, e viajam em pesquisas sobre o mundo da química a figura 1 descreve qual "inseto" ficará com as misturas de solutos diferentes que não reagem entre si.



Figura 1. Página 7.

Conclusão

Através dos personagens e situações criadas por nós, podemos tornar a química mais acessível e fácil de entender. Além disso, ao criar uma história em quadrinhos, somos desafiados a simplificar os conceitos para que possam ser transmitidos de forma clara e compreensível. Esse processo de simplificação não apenas fortalece nossa própria compreensão, mas também nos capacita a comunicar esses conceitos de maneira eficaz para nossos colegas.

Uma vez que a história em quadrinhos de química é criada, podemos compartilhá-la com nossos colegas e professores. Essa troca de ideias e conhecimentos não apenas promove um senso de realização, mas também cria uma oportunidade de ensinar e aprender uns com os outros. Além disso, a discussão em grupo nos ajuda a consolidar ainda mais nossos conhecimentos e a desenvolver habilidades de comunicação.

Agradecimentos

Colégio Estadual Santa Clara e equipe gestora, alunos e professores.

Referencias e notas

- (1) Tavares, A. P.; LÚCIA COSTA Amaral, C. L. C.; A utilização de histórias e quadrinhos no ensino de química: um mapeamento da produção científica nos enpec. Congresso Internacional de Educação e Tecnologias | Encontro de Pesquisadores em Educação a Distância, São Carlos - SP, 2020.
- (2) Konrad, C. J.; Bedin, E.; Experimentação no ensino de química e outros momentos pedagógicos: uma prática colaborativa de investigação, Química: ensino, conceitos e fundamentos, p 14-21, 2021.
- (3) Covre, G.J; Livro Química Total-Professor.2001.
Niezer T.M. Ensino de Soluções Químicas Por Meio Da Abordagem Ciências-Tecnologia Sociedade 2012.

Turbidimetria na sala de aula: usando impressão 3D para tornar instrumentos acessíveis

Eduardo da Costa Ilha^{1*} (IC), Eloisa Tofolo Elicker¹ (IC), Tatiane de Andrade Maranhão¹ (PQ), Santiago Francisco Yunes¹ (PQ). *eduardoilha2010@gmail.com

¹Universidade Federal de Santa Catarina, Departamento de Química, Florianópolis, Santa Catarina, Brasil, 8040-900.

Palavras-Chave: Impressão 3D, Química Analítica, Tecnologias e Educação, Materiais para o ensino.

Introdução

As práticas dentro do Ensino de Química são muitas vezes negligenciadas ou limitadas, principalmente quando se trata da química instrumental, tendo em vista os grandes custos associados a instrumentação¹. Porém com a ascensão de novas tecnologias, diversos pesquisadores passaram a unir esforços visando inovar, diversificar e simplificar as metodologias de ensino². Na área da Química, a impressão 3D começa a ganhar espaço, sendo explorada para construção de materiais didáticos, como modelos tridimensionais de moléculas e átomos², e também tem sido uma interessante alternativa na construção de instrumentos de análises químicas diversos³. O presente trabalho buscou construir um turbidímetro, através de modelagem 3D, e avaliar sua performance para uso prático em salas de aula.

Resultados e discussão

Foi desenvolvido um turbidímetro a fim de quantificar a turbidez de amostras de água obtidas em um experimento sobre tratamento de água turbida, realizados com alunos da primeira fase do Curso de Química da Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC). O equipamento foi modelado, por meio de um software gratuito (*OnShape*), otimizado para impressão 3D (Figura 1). Como fonte de radiação do equipamento, utilizou-se um diodo emissor de luz (LED) branca de alto brilho (3V, 2,4A) e como detector, um resistor dependente de luz (LDR) conectado a um multímetro no modo ohmímetro.



Figura 1. Imagem do equipamento impresso em filamento PLA (pintado com tinta preta para melhor isolamento luminoso).

Visando a validação do instrumento, construiu-se uma curva de calibração externa, utilizando CaCO_3 , a fim de quantificar as águas tratadas nas aulas práticas da UFSC. Como figuras de mérito encontrou-se: 1,46% de precisão instrumental, $\text{LOD} = 0,0015 \text{ g L}^{-1}$, $\text{LOQ} = 0,0044 \text{ g L}^{-1}$, faixa de linearidade = $0,0044\text{-}0,3333 \text{ g L}^{-1}$ e $R^2 = 0,996$. Para validação da exatidão, foram realizados testes de adição e recuperação em amostra real em 2 níveis, obtendo de 95% e 103%, valores excelentes. Além disso, replicou-se a metodologia no Instituto Federal de Santa Catarina, em equipamento comercial, construindo uma curva de referência NTU vs $[\text{CaCO}_3] \text{ (g L}^{-1}\text{)}$, onde quantificou-se uma mesma amostra real, obtendo $38,8 \pm 0,1 \text{ NTU}$ no equipamento proposto e $36,4 \text{ NTU}$ no comercial (6,83% de erro experimental).

Conclusões

O turbidímetro desenvolvido através de modelagem 3D mostrou-se adequado para quantificação de turbidez em amostras para nível de ensino, com boa precisão instrumental e exatidão, podendo se tornar uma alternativa acessível para aulas práticas voltadas à turbidimetria.

Agradecimentos

LEMA, UFSC, IFSC, Ciência na escola

Referencias e notas

- (1) KHOSH MARAM, L.; MOHAMMADI, M.; BABADI, A. N. A portable low-cost fluorimeter based on LEDs and a smart phone. *Microchemical Journal*, [S.L.], v. 171, p. 106773, dez. 2021. Elsevier BV
- (2) BASNIAK, M. I.; LIZIERO, A. R. A IMPRESSORA 3D E NOVAS PERSPECTIVAS PARA O ENSINO: possibilidades permeadas pelo uso de materiais concretos. *Revista Observatório*, [S. l.], v. 3, n. 4, p. 445–466, 2017..
- (3) AGRAWAAL, Harshit; THOMPSON, J.e.. Additive manufacturing (3D printing) for analytical chemistry. *Talanta Open*, [S.L.], v. 3, p. 100036, ago. 2021. Elsevier BV. Dupont, J. *J. Braz. Chem. Soc.* **2004**, 15, 341.

Terrário como oficina lúdica no ensino e aprendizagem de química

Beatriz Fernanda Da Silva¹ (IC)*, Morgana Sofia Zilse² (FM), Keysy Solange Nogueira³ (PQ). beatrizfesilva@gmail.com

Universidade Federal de Santa Catarina – Campus Blumenau

Palavras-Chave: Terrário, Ciclo da água, Atividade lúdica, Oficina, Ensino de química.

Introdução

O terrário representa um ecossistema natural em miniatura composto por fatores bióticos e abióticos. Adotá-lo em práticas pedagógicas por meio de oficinas pode possibilitar um ensino de química contextualizado, no qual o educando participa de forma ativa do seu processo de aprendizagem, e o professor atua como um mediador, orientando o estudante na observação e investigação dos fenômenos que ocorrem no terrário. Dessa forma, o estudante pode propor explicações sobre os fenômenos que observa e desenvolver habilidades importantes, como a observação, análise crítica e elaboração de hipóteses.¹ Ademais, essa atividade pode ser facilmente adaptada a diferentes contextos, podendo ser realizada em sala de aula, laboratórios, jardins ou parques. A oficina de construção de terrários nas aulas de química propicia a abordagem de conceitos associados ao meio ambiente, ciclo da água, estados físicos da matéria, entre outros. Assim, acredita-se que a oficina de terrários pode incentivar o desenvolvimento do senso crítico dos estudantes e a formação do "sujeito ecológico"². De acordo com o exposto, o objetivo da oficina, intitulada "Construção interativa de terrários: meio ambiente e química", foi levar os estudantes a compreenderem os estados físicos da matéria, o ciclo da água e a sua importância para o equilíbrio do meio ambiente.

Resultados e discussão

A oficina foi realizada na IV Semana Acadêmica Integrada da Química da UFSC-Blumenau, na Semana do Meio Ambiente da UFSC e na E.E.B Luiz Delfino. Participaram da oficina em torno de 80 estudantes, dentre eles, graduandos de química e estudantes da educação básica. Durante a atividade, a ministrante realizou uma breve introdução sobre o conceito de terrário e, na sequência, os participantes construíram os terrários. Posteriormente, foram incentivados a comparar os terrários recentemente construídos com um terrário construído anteriormente, em que podiam observar a condensação da água e, assim, reconhecer a presença do ciclo da água. Ao longo da oficina, foram abordados conceitos de fatores bióticos e abióticos, o mecanismo da fotossíntese, a necessidade de determinados elementos químicos para um solo fértil, bem como a importância da preservação e manutenção do equilíbrio entre todos os componentes no terrário. No final da oficina, os participantes responderam a

um questionário que abordava os conceitos abordados durante a atividade. Uma das questões indagava os estudantes sobre como uma planta poderia sobreviver em um pote fechado, para essa questão a maioria dos estudantes respondeu que a sobrevivência era possível devido ao terrário funcionar como um microssistema em que ocorria a fotossíntese e o ciclo da água. Outra questão inquiria os participantes sobre a importância de um solo rico em húmus para manutenção dos fatores bióticos e abióticos no terrário, para essa questão, os estudantes responderam que o solo rico em nutrientes deveria conter potássio, fósforo, cálcio, etc., além de minhocas, materiais orgânicos, entre outros. Infere-se que a abordagem pedagógica incentivou os estudantes a refletirem e construir conhecimento sobre o ciclo biogeoquímico por meio da observação e análise prática.

Conclusões

Os participantes da oficina aprenderam sobre o ciclo da água ao observar o terrário que criaram, identificando fenômenos como a condensação e a evaporação, conforme evidenciado nas respostas dos questionários. Eles conseguiram reconhecer as características do terrário que o transformam em um microecossistema, adquirindo, assim, consciência sobre a importância da preservação ambiental.

Agradecimentos

Agradecemos à escola parceira E.E.B Luiz Delfino e seus estudantes, aos Licenciandos em Química Bruna Quost, Maryanna Carneiro, Isabela Santos e Jeison Petersen, ao PROBOLSAS (Edital nº 4/2022/PROEX) e a UFSC-Blumenau.

Referências e notas

- (1) MOURA, L. N., *et al.* O terrário como temática no ensino de ciências na educação do campo. **REMOA**, v. 14, p.261-277, 2015.
- (2) CARVALHO, I.C.M. **A invenção do sujeito ecológico**: identidades e subjetividade na formação dos educadores ambientais. In: Sato, M. & Carvalho, I. C. M. (orgs) Educação Ambiental: pesquisa e desafios. Porto Alegre, Artmed, 2005.

Tutoria entre pares: principais dificuldades na aprendizagem de química enfrentadas por alunos de graduação da UFSM

Matheus Gass Lopes¹ (IC)*, Eliane Cristina Amoretti¹ (TC), Sailer Santos dos Santos¹ (PQ)

*E-mail: matheusgass0310@gmail.com

¹Universidade Federal de Santa Maria, Centro de Ciências Naturais e Exatas (CCNE).

Palavras-Chave: Aprendizagem, Ensino, Dificuldades, Tutoria entre pares.

Introdução

Em 2019, aderindo ao planejamento da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), o Centro de Ciências Naturais e Exatas (CCNE) empregou um importante esforço ao criar a Central de Tutoria, um projeto multidisciplinar, que atende às demandas acadêmicas das disciplinas vinculadas a esse Centro. O objetivo principal era criar um ambiente isento de julgamento, para esclarecer dúvidas. Essa ideia atende amplas áreas de estudo por uma abordagem embasada no conceito de *peer tutoring*, na qual os alunos com maior expertise auxiliam outros no processo de aprendizagem¹. Somada à aprendizagem compartilhada², alinha-se a perspectiva de estudo ativo e a ajuda na superação de quaisquer defasagens relacionadas às ciências básicas. Essa iniciativa visa promover uma aprendizagem na qual o estudante é o agente na produção de conhecimento, oferecendo suporte para aqueles que buscam melhorar seu desempenho acadêmico nas ciências básicas e seus campos de especialização. No contexto do CCNE, a Química está subdividida em Química Geral, Química Orgânica, Química Inorgânica e Físico-Química. Este trabalho tem por objetivo fazer um levantamento dos atendimentos prestados pela Central de Tutoria vinculados à área de Química no período de 2022 a 2023 com o objetivo de detalhar as principais demandas existentes na área.

Resultados e discussão

Com os dados dos atendimentos realizados, foi organizado um levantamento dos conteúdos mais recorrentes para a área da química nos semestres de 2022/2 e 2023/1. A fim de esboçar um perfil de dúvidas bem definido optou-se por dividir essas informações em cinco subáreas: Química Orgânica, Química Inorgânica, Físico-Química, Química Analítica e Química Geral (Figura 1). Uma análise revela que conteúdos como reações orgânicas, estequiometria de reações e princípios de termodinâmica são responsáveis pelas principais dúvidas dos alunos, sendo os assuntos mais procurados nas áreas de Química Orgânica, Química

Geral e Físico-Química, respectivamente. É importante notar que tais tópicos são abordados, segundo a Base Nacional Comum Curricular³, em algum momento da formação acadêmica desses estudantes, incluindo o Ensino Médio.

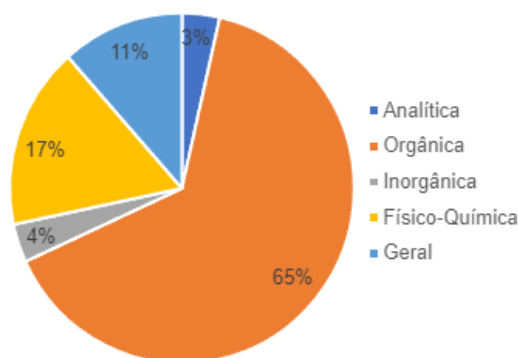


Figura 1. Percentual de atendimentos na tutoria para a área de química nos semestres de 2022/2 e 2023/1.

Conclusões

Percebe-se que há uma lacuna na aprendizagem de química pelos acadêmicos, anterior à graduação. Assim, elencar quais conteúdos são responsáveis pelas principais dúvidas pode auxiliar o desenvolvimento de abordagens e estratégias mais efetivas para o ensino de química. Além disso, possibilita um olhar mais atento sobre a didática utilizada e a produção de materiais alternativos que tornem o processo de aprendizagem mais dinâmico e esclarecedor, tanto pelo aluno quanto pelo professor/tutor.

Agradecimentos

Agradecemos a toda equipe da Central de Tutoria pelo acolhimento e disposição. MGL agradece a bolsa concedida (UFSM).

Referências e notas

- (1) Duran, D; Vidal, V. Tutoria: aprendizagem entre iguais: da teoria à prática. Editora Artmed, 1ª ed., Porto Alegre, jan. de 2007
- (2) MORAN, J. Metodologias ativas para uma educação inovadora: uma abordagem teórico-prática. Porto Alegre: Penso, 2018.
- (3) Brasil. Ministério da Educação. Base Nacional Comum Curricular. Brasília. 2018

A potência do mapeamento do Perfil Epistemológico na formação de professores

Fernanda Karolaine Dutra da Silva (PG)^{1*}, Vitória Schiavon da Silva (PG)², Bruno dos Santos Pastoriza (PQ)³, Alessandro Cury Soares (PQ)⁴. *fernandadutraa5@gmail.com

¹Universidade Federal de Pelotas, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Laboratório de Ensino de Química, Campus Universitário Capão do Leão, s/n. CEP: 96160-000.

Palavras-Chave: História, Filosofia e Epistemologia da Ciência, Perfil Epistemológico, Ensino de Química.

Introdução

No contexto brasileiro, é possível observar a discussão sobre a evasão de estudantes no curso de formação de professores em Química. Nessa perspectiva, alguns estudos (GIL-PÉREZ., 1991; CARLOS M., 1998) apontam obstáculos de caráter formativo nos cursos de licenciaturas que precisam ser superados. Nesse sentido, este trabalho tem como objetivos estudar a partir de Bachelard às zonas filosóficas que compõem o Perfil Epistemológico na formação de professores de Química, uma vez que assumimos que o mapeamento sobre como os conceitos na formação de professores esta sendo construída pode ser um meio de indentificar as melhorias necessarias para a formação, e também para a retenção de estudantes.

Resultados e discussão

Segundo Bachelard (1991), o perfil epistemológico considera a coexistência de diferentes perspectivas filosóficas para um mesmo conceito científico. Para análise desse perfil são utilizadas as zonas filosóficas que o autor divide em cinco: o realismo ingênuo, o empirismo o racionalismo clássico ou tradicional, o racionalismo completo, e o racionalismo discursivo. Essa ordem considera a construção de uma complexidade crescente dos conceitos. Sendo assim, podemos pensar que qualquer conceito vai se tornando mais racional conforme vai avançando nas zonas filosóficas.

Considerando as noções de perfil epistemológico, Lobo (2008) afirma que o Ensino de Química não deve se limitar a princípios e leis (fixas e invariáveis) aplicados aos fenômenos químicos (característica pertencente ao positivismo). Sendo assim, podemos pensar na importância da história da Química para a compreensão da construção do conhecimento químico. Diante do exposto, Mortimer (1992) afirma que a utilização do perfil epistemológico em sala de aula, assumindo a história da Química como eixo orientador do processo de ensino, contribui para a superação de um ensino dogmático, uma vez que demarca as rupturas que ocorrem ao longo da história da construção dos conceitos e considera seu caráter fundamentalmente

dinâmico. Com essa pesquisa que esta em andamento pensamos que iremos evidenciar que as zonas filosóficas do realismo ingenuo, empirismo e o racionalismo clássico sejam os mais evidentes no mapeamento do perfil epistemológico na formação de professores, conforme o encontrado nos estudos de Dorigan et., al.(2019). Nesta perspectiva, Talanquer (2016) discute sobre a importancia do entendimento dos conceitos químicos para que haja uma potencia no processo de ensino. Portanto, consideramos que o Perfil Epistemológico pode ser uma forma de se descobrir alguns pontos que podem ser melhorados na formação de professores.

Conclusões

Sendo assim, podemos assumir a importância de reconhecer o perfil epistemológico existente na formação de professores, considerando o pluralismo filosófico das idéias científicas e suas potencias, afim de uma busca por melhorias.

Agradecimentos

Gostaríamos de agradecer a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior pelo apoio financeiro que possibilita essa investigação.

Referencias e notas

- (1) Bachelard, G. **A Filosofia do Não: filosofia do novo espírito científico**. Trad. Joaquim José Moura Ramos. (5ª edição ed.). Lisboa: Editorial Presença, 1991.
- (2) Carlos, M. G. Pesquisa sobre a formação de professores: o conhecimento sobre aprender a ensinar. **Revista Brasileira de Educação**, v. 9, p. 51-75, 1998.
- (3) Gil-Pérez, D. (1991) Que hemos de saber y saber hacer los profesores de Ciencias? **Enseñanza de las Ciencias**, Barcelona, v. 9, n. 1, p. 69-77, 1991.
- (4) Lobo, F. S. O ensino de química e a formação do educador químico, sob o olhar bachelardiano. **Ciência & Educação**. v. 14, n. 1, 2008.
- (5) Mortimer, E. F. (1992). Pressupostos epistemológicos para uma metodologia de ensino de Química: mudança conceitual e perfil epistemológico. **Química Nova**, São Paulo, v. 15, n. 3, p. 242 - 249, 1992.
- (6) DORIGAN, Larissa et al. Perfil epistemológico para o conceito de transformações apresentado nos livros didáticos de química da 1ª série do ensino médio..**Revista Brasileira de Ensino de Ciência e Tecnologia**, v. 12, n. 1, 2019.
- (7) TALANQUER, Vicente. Central ideas in chemistry: An alternative perspective. **Journal of Chemical Education**, v. 93, n. 1, p. 3-8, 2016.

Apoio Educacional Especializado de Química: planejamentos acerca do Desenho Universal para a Aprendizagem

Eduarda Vieira de Souza¹ (PG)*, Fernanda Jardim Dias da Piedade² (PG), Ângela Brum Soares³ (FM), Bruno dos Santos Pastoriza⁴ (PQ) vieirasdu@gmail.com

1,2,3,5 Universidade Federal de Pelotas, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Laboratório de Ensino de Química, Campus Universitário Capão do Leão, s/n.

4 Departamento de Atendimento Educacional Especializado, Associação Escola Louis Braille, Pelotas-RS.

Palavras Chave: Educação Inclusiva, Recursos, Ensino de Química.

Introdução

Em vista de que no âmbito educacional integração tem a ver com o acesso onde a aprendizagem depende somente da capacidade de o indivíduo se adaptar às condições que o espaço oferece e inclusão se refere às formas de entender e conhecer as diferenças reorganizando o espaço, as práticas e os documentos que compõem esse contexto (Mantoan, 2003), compreende-se que essa diferença se faz fundamental para a implementação efetiva dos princípios da Educação Inclusiva, e sob esse entendimento se institui o Projeto Por uma Docência Inclusiva. Com atuação majoritariamente no campo do Ensino de Química, este projeto busca sobretudo, estudar e desenvolver meios capazes de tornar, o conhecimento acerca desta ciência, comum a todos os indivíduos. Com base nisso, o presente resumo tem como objetivo divulgar as ações e potencialidades do projeto no contexto de apoios educacionais especializados no campo da Química.

Resultados e discussão

As ações do projeto acontecem em parceria com uma escola especializada para alunos deficientes visuais e conta com um total de sete estudantes, atendidos semanalmente, em períodos de 45 minutos cada. Embora o âmbito seja de atendimento específico para um perfil de alunos, a proposta é que toda e qualquer atividade planejada e desenvolvida, seja projetada em parceria com a escola comum, buscando métodos de promover a inclusão efetiva desses alunos. E além disso, parte-se do entendimento de que os indivíduos se diferem uns dos outros de diversas maneiras e que o processo de ensino e aprendizagem deve dar conta de atender as especificidades de cada indivíduo. Para isso, utiliza-se da proposta do Desenho Universal para a Aprendizagem, uma abordagem que tem seus princípios semelhantes aos da Educação Inclusiva, uma vez que busca proporcionar através de vias

alternativas a possibilidade de se desenvolver os processos de ensino e aprendizagem de forma mais efetiva para alunos com e sem deficiência (Lindemann, Bastos, & Roman, 2017). E embora seja pouco conhecida e disseminada no Brasil, suas características a tornam uma proposta promissora no contexto da inclusão escolar, especialmente, por se tratar de uma construção de práticas universais (Zerbato, 2018).

Conclusões

Com essas discussões e os resultados obtidos com as ações do projeto, conclui-se que há uma grande importância de se utilizar do DUA para que os alunos consigam compreender com clareza os conteúdos referentes ao ensino de Química, nos diferentes níveis que o envolvem e tenham uma base fundamentada para melhor compreensão dos fenômenos a seu redor. Principalmente se levar em consideração que o ensino desta ciência se utiliza, em grande parte, de informações que a visão nos proporciona.

Agradecimentos

A CAPES pelo financiamento e apoio nas pesquisas. A UFPel e o Programa de Pós-Graduação em Química.

Referências e notas

- (1) Lindemann, R., Bastos, A., & Roman, B. (2017). Desenho Universal de Aprendizagem e Microensino na Formação de Professores de Química. *Revista de Ciência e Inovação do IF Farroupilha*, 2(1), 11-19.
- (2) Mantoan, M. (2003). *Inclusão escolar: o que é? Por quê? Como fazer?* São Paulo: Moderna.
- (3) Zerbato, A. P. (2018). *Desenho Universal para Aprendizagem na Perspectiva da Inclusão Escolar: Potencialidades e Limites de uma Formação Colaborativa*. Centro de Educação e Ciências Humanas. São Carlos: Universidade Federal de São Carlos.

O Átomo e a Molécula: uma discussão central sobre as Ligações Químicas de Lewis

Vitória Schiavon da Silva¹ (PG)*, Fernanda Karolaine Dutra da Silva² (PG), Bruno dos Santos Pastoriza³ (PQ), Alessandro Cury Soares⁴ (PQ). vitoriaschiavondasilva@gmail.com

1,2,3,4 Universidade Federal de Pelotas, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Laboratório de Ensino de Química, Campus Universitário Capão do Leão, s/n. CEP: 96160-000).

Palavras Chave: *Ligação covalente, Ligação iônica, Natureza da ciência.*

Introdução

Para compreendermos os caminhos percorridos por Lewis para a construção da sua proposta referente às Ligações Químicas (LQ), iremos analisar um de seus artigos publicados no ano de 1916, intitulado como *O Átomo e a Molécula*¹, no Journal of the American Chemical Society. Com a publicação desse artigo, Lewis consegue apresentar sua proposta para a comunidade científica da época, com as explicações mais detalhadas de seus estudos. Este trabalho permitiu entendimentos a respeito da natureza do conceito de Ligações Químicas e como se apresenta suas discussões no campo do Ensino. Esse processo permite trazer para sala de aula de Química não somente os resultados, mas também o processo, a divergência de ideias e estudos – em outras palavras, mobiliza elementos da história e da epistemologia no Ensino de Química.

Resultados e discussão

No início do século XX, acreditava-se que as LQ eram formadas por meio da transferência de elétrons entre os átomos. Foi em 1916 que Lewis apresenta sua nova teoria a respeito das LQ, trazendo uma ideia mais qualitativa, explicando a ligação entre os átomos através do compartilhamento de elétrons. Traz características das substâncias polares e não polares, afirmando que esta classificação poderia ser explicada somente a partir dos conhecimentos químicos, mas que o ideal seria explicar sua classificação a partir de uma teoria da estrutura atômica. Sendo assim, o autor começa a direcionar as discussões para o que foi chamado de “teoria do átomo cúbico”, colaborando na explicação do par compartilhado. Seu modelo do átomo, no qual os elétrons de valência de um átomo se distribuem pelos vértices de um cubo, variando de 0 a 8 (figura 1).

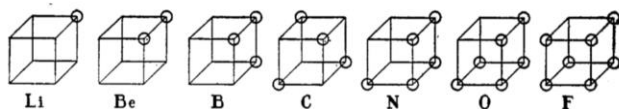


Figura 1. Modelo do átomo proposto por Lewis.

Portanto, pensando nas ligações iônicas e covalentes, Lewis propôs que as principais propriedades das substâncias (nível macroscópico) eram o resultado da mobilidade dos elétrons (nível submicroscópico). Ou seja, os átomos organizados por elétrons de maior mobilidade, que se referem à liberdade do elétron de se mover de uma posição para outra, é uma característica da ligação polar (iônica); já os átomos organizados com os elétrons com menor mobilidade são as ligações apolares (covalente). No Ensino de Química contemporâneo as LQ são explicadas não pela mobilidade de elétrons que influencia na formação de cargas eletrônicas, como foi apresentado nos estudos de Lewis a partir de uma visão submicroscópica. O ensino de LQ é frequentemente relacionado com o que é chamado de “regra do octeto”, uma visão associada ao nível simbólico. Importante destacar que para explicar seu modelo atômico Lewis baseou-se na regra do octeto, mas suas considerações não e limitam a esta discussão. Essa relação entre a estabilidade do átomo e a regra do octeto pode ser um exemplo da noção de tradição existente na disciplina de Química.

Conclusões

Os estudos de Lewis referente à ligação covalente (compartilhamento dos pares de elétrons) estão sendo trabalhados no Ensino de Química, porém a forma como Lewis explica sua teoria originalmente é desconsiderada. Enquanto Lewis explica a atração entre os átomos a partir das propriedades das substâncias e estrutura da matéria, em sala de aula se explica a atração entre os átomos associado à enunciação restrita e memorística da regra do octeto.

Agradecimentos

A CAPES pelo financiamento e apoio as pesquisas. A Universidade Federal de Pelotas e ao Programa de Pós-graduação em Química.

Referencias e notas

LEWIS, Gilbert N. The atom and the molecule. Journal of the American Chemical Society, v. 38, n. 4, p. 762-785, 1916.

Uma aula sobre vidrarias e medição de volumes: articulando a temática de Gênero, Química e Arte

Jamily da Silva dos Anjos (IC)^{1*}, Nátali Alves (IC)¹, Diogo La Rosa Novo (PQ)¹, Wiliam Boschetti (PQ)¹, Bruna Adriane Fary (PQ)¹ *Jamily.mikika.129@gmail.com

¹Universidade Federal de Pelotas (UFPEL), Laboratório de Ensino de Química, Campus Universitário Capão do Leão.

Palavras Chave: Experimentação, Gênero, Ciências, Arte, PIBID.

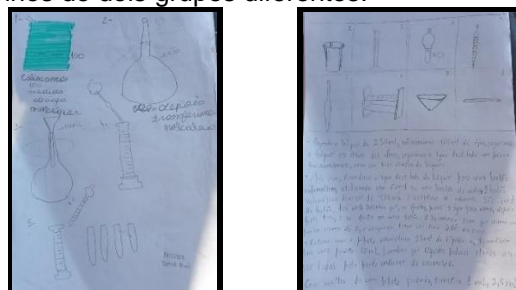
Introdução

A experimentação é uma importante ferramenta no Ensino de Química e uma estratégia para que seja eficaz é a contextualização, ao invés de aulas experimentais do tipo “receita de bolo” (GUIMARÃES, 2009, p.198). Por isso, analisar o contexto que os estudantes vivem facilita isso. É desta forma que o Programa Institucional de Bolsas de Iniciação à Docência (PIBID) contribui ao acompanhar as turmas de escolas públicas, o que possibilita identificar necessidades específicas. Assim, o PIBID Química da UFPEL acompanhou a disciplina “Práticas de Laboratório” do 1º ano do Ensino Médio de uma escola municipal de Pelotas. Tendo em vista isso, as licenciandas do PIBID desenvolveram uma aula sobre vidrarias e medição de volumes com a temática de Gênero, Química e Arte através da Divulgação Científica (DC), tendo em vista que 71% da turma era constituída de alunas. Nesse sentido, o objetivo deste trabalho é relatar sobre a aula desenvolvida.

Resultados e discussão

A aula buscou contextualizar uma prática de laboratório através da DC feminina. Para isso, foi realizada uma prática de medição de volumes, mas que os estudantes participantes anotassem todo o passo a passo realizado, bem como seus resultados e que desenhassem todas as vidrarias utilizadas, fazendo uma analogia a Marie-Anne Lavoisier, considerada um símbolo da mediação entre Arte e Ciência (BERETTA, 2002). Desta forma, os estudantes conheceriam mais sobre a presença de uma mulher tanto no ramo da Ciência, quanto no da Arte; já que foi ela quem elaborou importantes desenhos para o *Traité Élémentaire de Chimie* de Lavoisier, considerado um clássico da Química Moderna (SANTOS, 2018). Os estudantes demonstraram grande interesse ao decorrer da aula. Ao ser pedido que desenhassem, os estudantes ficaram animados seguido do comentário: “deixa que isso eu faço, porque é a minha área!”. O que evidencia a importância de diferentes recursos no Ensino de Química, sendo o desenho uma ótima ferramenta para os estudantes organizarem as informações (MARINHO

et al, 2015). As Figuras 1 e 2 são exemplos de dois desenhos de dois grupos diferentes.



Figuras 1 e 2: Desenhos produzidos por dois grupos que participaram da atividade.

Conclusões

Portanto, conclui-se que é importante contextualizar aulas experimentais de Química, como também utilizar diferentes recursos, como a técnica do desenho e relacionar com figuras indispensáveis para a História da Ciência, principalmente figuras femininas, tendo em vista o seu apagamento histórico.

Agradecimentos

À UFPEL e à CAPES.

Referencias e notas

- (1) GUIMARÃES, Cleidson Carneiro. Experimentação no Ensino de Química: Caminhos e descaminhos rumo à aprendizagem significativa. *Revista Química Nova na Escola*. Vol 31, nº 3, p.198-202. 2009.
- (2) BERETTA, Marco. *Imaging a Career in Science: The Iconography of Antoine Laurent Lavoisier*, 2002.
- (3) SANTOS, Paloma Nascimento dos. Arte, Ciência e Gênero: Marie-Anne, Lavoisier e a análise do retrato de um casal científico. *Redequim*, Pernambuco, v. 1, n. 1, p. 154-173, jan. 2018.
- (4) MARINHO, Juliana Benassi; JAHN, Vitória Ferreira. Interpretação de imagens: a importância de desenhos esquemáticos no ensino médio. In: **SEMINÁRIO REGIONAL LICENCIATURAS/SC**, 2015, Lages. Trabalho, 2015. p. 1-10.

Júri simulado sobre a utilização de embalagens biodegradáveis no ensino médio

Tavane da Silva Rodrigues^{1*} (PG); Charlene Barbosa de Paula² (PG); Fábio André Sangiogo³ (PQ).
 *rodriguestavane1@gmail.com

Universidade Federal de Pelotas, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos,
 Laboratório de Ensino de Química, Campus Universitário Capão do Leão.
 Palavras Chave: Ensino de Química, abordagem CTS, Educação Básica

Introdução

A atuação docente é cercada de desafios, principalmente no que diz respeito a implementação de uma formação de estudantes através de um processo educacional contextualizado, interdisciplinar e inclusivo, que considere aspectos sociais, tecnológicos e ambientais¹. Uma vez que, esses são pontos defendidos indicados nos documentos da educação básica, uma alternativa para tal implementação é a utilização de abordagens que buscam a formação para além do conceito isolado e fragmentado. Nesse cenário, defendemos a abordagem temática denominada Ciência Tecnologia e Sociedade (CTS), que tem o objetivo central de desenvolver a alfabetização científica e tecnológica dos cidadãos, auxiliando os estudantes a construir conhecimentos, habilidades e valores necessários para tomar decisões responsáveis sobre questões que envolvem as inter-relações entre ciência, tecnologia e sociedade². E, neste trabalho, temos o objetivo de apresentar a atividade de um júri simulado, desenvolvida em uma turma de Ensino Médio, de uma escola pública estadual de Pelotas. A atividade faz parte do recorte das ações da temática do “Ciclo dos materiais”, implementada com base na CTS. O registro das atividades fora realizada por registros em áudio e em diário de bordo.

Resultados e discussão

A atividade de júri simulado³ foi desenvolvida no itinerário formativo do “Ciclo de vida dos materiais”, do “novo” ensino médio. Esta atividade consistia em os estudantes defenderem um ponto de vista frente a sociedade, com base no estudo de textos fornecidos pela professora. Assim, a turma foi dividida em três grupos, dos quais um era a favor e um era contra uma lei que obrigava a utilização de embalagens biodegradáveis (ambos formados por advogados, cientistas, empresas, governo, etc.) e o terceiro era constituído pela sociedade, que deveria estudar, analisar e ser convencida de qual lado apoiar. O grupo favorável defendeu a viabilidade do uso com argumentos como “As embalagens biodegradáveis são

boas, pois não poluem o meio ambiente, considerando que nem todo descarte é feito corretamente”. Nesse caso o impacto ambiental, poluição e tempo de decomposição dos materiais são considerados como pontos relevantes para os estudantes. O segundo grupo, que era contrário à utilização das embalagens, utilizou de argumentos como “Essas embalagens são muito mais caras, não seria qualquer pessoa que conseguiria comprar”. Nesse caso as questões econômicas e sociais são mais importantes que as ambientais para os estudantes e para os argumentos. O grupo que representava a sociedade apoiou o uso das embalagens biodegradáveis, aceitando o argumento do grupo favorável, e justificou: “A gente deve sempre pensar no meio ambiente, principalmente que tem condições de comprar. Mas quem não tem pode seguir comprando as normais, mas sempre pensando no descarte correto”. Sendo assim, o grupo que representava a sociedade considerou os dois pontos defendidos por ambos os grupos, contrários e favoráveis a lei.

Conclusões

A atividade permitiu discutir pontos pertinentes ao objetivo da aula e do itinerário formativo, a exemplo das questões sociais e que contemplam a proposta CTS. Ela viabilizou momentos de reflexão com os estudantes sobre alternativas e possíveis melhoras no impacto social, econômico e ambiental, ultrapassando a perspectiva de ensino meramente conceitual.

Agradecimentos

A CAPES (001), ao PPGQ-UFPEL e ao Labeq.

Referencias e notas

- (1) Gonzaga, G. R., Paiva, D. C. D., & Eichler, M. L. Química Nova, **2020**, *43*, 493-505.
- (2) Santos, W. L. P.; Mortimer, E. F. Ensino Pesquisa em Educação em Ciências **2022**, *2*, 1-23.
- (3) De Souza, P. V. T., Gonçalves, E. A., Souza, D. R., & Amauro, N. Q. (2019). *Revista Debates em Ensino de Química*, **2019**, *5(1 ESP)*, 5-15.

O acidente com Césio-137 em Goiânia como possibilidade para o Ensino de Radioatividade.

*Alice Gaier Viario¹ (PG), Alessandro Cury Soares¹ (PQ), Bruno dos Santos Pastoriza¹ (PQ)

1. Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Universidade Federal de Pelotas, Campus Capão do Leão, Pelotas.

* alicegaier@gmail.com

Palavras Chave: Radioatividade, Acidente Cs-137, ABP, Ensino de Química, Isótopos, Educação Crítica.

Introdução

A contextualização na abordagem do conhecimento científico é desejável para o Ensino de Química¹. Quando tratamos do Ensino Superior cabe salientar que mais do que ensinar química, está se formando profissionais da área². Desenvolver o pensamento crítico e a tomada de decisões, portanto, é importante o ensino contextualizado e a Aprendizagem Baseada em Problemas (ABP) pode ser uma boa ferramenta³.

Assim, para esse trabalho propomos a abordagem da Radioatividade a partir de uma situação problema baseada no acidente radiológico com Césio 137 em Goiânia^{4,5}.

Resultados e discussão

Em 1987 na cidade de Goiânia, um equipamento do prédio desativado do Instituto Goiano de Radioterapia que continha um núcleo de Césio 137 foi vazado. Este acabou sendo um dos piores desastres nucleares do mundo devido à irresponsabilidade no destino dos equipamentos em desuso da clínica^{4,5}.

Então, uma forma de abordar essas questões no Ensino de Química é através de uma situação problema, nesse caso, recontando a própria história da tragédia em Goiânia. Os estudantes serão levados a pensar, caso atuassem enquanto profissionais responsáveis da cidade de Goiânia ou do estado de Goiás quais medidas tomariam para:

- 1) evitar que o acidente acontecesse;
- 2) identificar que o vazamento ocorreu;
- 3) tratar os irradiados e contaminados;
- 4) evitar que mais pessoas sejam irradiadas;
- 5) tratar os resíduos contaminados;
- 6) informar a população no geral acerca do ocorrido.

Esses são alguns pontos que podem ser abordados com o tema, e a partir deles os tipos de radiação podem ser

abordados, como também sua história, os efeitos biológicos, aplicações, etc^{6,7}. Esta é uma forma de contextualizar o Ensino, buscando criticidade na formação de profissionais da Química.

Conclusões

É possível abordar o tema da Radioatividade no Ensino de Química de forma contextualizada e buscando construir pensamento crítico e tomada de decisões, a partir da abordagem da Aprendizagem Baseada em Problemas. O acidente com o isótopo radioativo do Césio ocorrido no Brasil é um bom caso para contextualizar o ensino dos tipos de radiação e seus efeitos biológicos, bem como as aplicações e impactos do uso da radioatividade na sociedade.

Agradecimentos

Agradecemos à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, CAPES, ao Programa de Pós-Graduação em Química e à UFPel.

Referências e notas

- (1) WARTHA, E. J.; SILVA, E. L.; BEJARANO, N. R. R. Cotidiano e Contextualização no Ensino de Química. Química Nova na Escola, v. 35, nº 2, p. 84-91, 2013.
- (2) GIL, A. C. Didática no Ensino Superior. São Paulo: Atlas. 1. ed. 2008.
- (3) SOUZA, S. C.; DOURADO, L. G. P. Aprendizagem baseada em problemas (ABP): um método de aprendizagem inovador para o ensino educativo. 2015.
- (4) BARRETO, P. M. C.; DA FONSECA, E. S. The Cs-137 radiological accident in Goiânia, Brazil: Conditions and results of the airborne radiometric survey. Brazilian Journal of Radiation Sciences, v. 11, n 2, p. 1-13, 2023.
- (5) OKUNO, E. Efeitos biológicos das radiações ionizantes: acidente radiológico de Goiânia. Estudos avançados, v. 27, n. 77, p. 185-200, 2013.
- (6) SASAKI, Y. Radiation is a Double-edged Sword—a Historical Review of Radiological Protection. 2023.
- (7) OLIVEIRA, L. G. et al. Como a genética contribuiu para compreender os efeitos biológicos da exposição humana à radiação ionizante de Césio-137?. Genética na Escola, v. 17, n. 2, p. 158-167, 2022.

Estudos de caso sobre fármacos para abordagem de estereoquímica no Ensino Superior

Flávia M. Bernardi¹ (PG), Maurícius S. Pazinato¹ (PQ)*.

*mauricius.pazinato@ufrgs.br

¹ Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Química, Porto Alegre, RS, Brasil.

Palavras Chave: Aprendizagem Baseada em Problemas, Cannabis sativa, antidepressivos.

Introdução

O método Estudo de Caso (EC) é reconhecido na literatura da área como uma estratégia de ensino centrada no aluno, comprovadamente eficaz na promoção de avanços conceituais e no desenvolvimento de habilidades cognitivas de alto nível.¹ Os casos consistem em narrativas reais ou fictícias sobre dilemas que podem ser resolvidos com base nos conceitos científicos. Considerando o contexto do ensino de Química Orgânica, um dos conteúdos citados pela literatura como sendo de difícil compreensão é o de estereoisomeria. As dificuldades estão relacionadas, em parte, à falta de conexão dos conceitos com o cotidiano.² Este trabalho tem por objetivo avaliar o emprego da metodologia EC na aprendizagem de conceitos relacionados à estereoquímica de acadêmicos de cursos da área saúde. Para isso, foram elaborados casos sobre a temática fármacos, a qual está diretamente relacionada à futura atuação profissional dos acadêmicos.

Resultados e discussão

Foram elaborados dois casos:

- Caso 1, intitulado **Toda droga é ruim?** aborda o uso medicinal da *Cannabis sativa* (maconha) para tratamento da esclerose múltipla com enfoque em duas das principais substâncias que a constituem: o CBD e o THC.

- Caso 2, intitulado **A eficácia é a mesma?** aborda o uso dos antidepressivos Citalopram e Escitalopram.

Os casos foram aplicados em duas turmas de disciplinas introdutórias de Química Orgânica para os cursos de Farmácia e Biomedicina da UFRGS, totalizando 56 sujeitos, os quais foram divididos em 13 grupos de quatro a cinco estudantes.

Os dados foram coletados por meio de pré e pós-testes com quatro questões descritivas sobre conceitos de estereoisomeria. Destaca-se esses instrumentos foram estruturados a partir de compostos químicos diferentes entre si e dos empregados nos casos, ou seja, foram utilizados os princípios ativos dos medicamentos Ketamina e Ibuprofeno no pré-teste e Talidomida e Naproxeno no pós-teste. Para o tratamento dos dados,

as respostas foram categorizadas em: Insatisfatória (RI), Parcialmente Satisfatória (RP) e Satisfatória (RS).

Os gráficos da Figura 1 mostram os resultados obtidos.

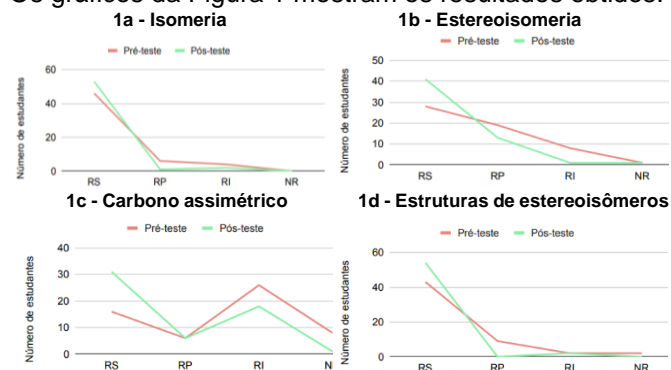


Figura 1. Resultados pré e pós testes.

Percebeu-se, no pós teste, um aumento no número de RS em todas as questões, com destaque para as **1b** e **1c**. Isso pode ser atribuído à escolha dos princípios ativos dos medicamentos envolvidos nos casos, pois todos eram constituídos por moléculas que apresentavam estereoisômeros, bem como aos problemas que só poderiam ser resolvidos com o entendimento desse conceito.

Conclusões

Conclui-se que o EC aliado a uma temática de interesse dos estudantes pode ser uma eficiente estratégia para contextualizar a Química Orgânica, principalmente a estereoquímica, além de promover o desenvolvimento conceitual.

Agradecimentos

CAPES – bolsa de mestrado.

Referências e notas

- (1) Bernardi, F. M.; Pazinato, M. S. *J. Chem. Edu.* **2022**, 99, 1211-1219.
- (2) Simões, J. N. E.; Campos, A. F.; Marcelino, C. J. D. A. C. *Investig. Ens. Ciênc.* **2016**, 18 (2), 327-346.

Revolução no Ensino do Efeito Indutivo: Técnicas e Estratégias Para o Ensino Médio

Eduardo Lopes Silva (PG)¹, Marcelo Vieira Migliorini (PQ)^{1,2*}. marcelo-migliorini@uergs.edu.br

¹ Universidade Estadual do Rio Grande do Sul - PPGSTEM - Campus Guaíba R. Santa Maria, 2300 - Jardim dos Lagos, Guaíba - RS, 92717-310

² Universidade Estadual do Rio Grande do Sul – Curso de Engenharia de Bioprocessos e Biotecnologia - Campus Santa Cruz do Sul, Avenida Independência, 2824 – Bairro Renascença, Santa Cruz do Sul - RS, 96815-326.

Palavras-Chave: Ensino de Química, Ensino Médio, Efeito indutivo, Eletronegatividade

Introdução

Este estudo visa averiguar a viabilidade do emprego do conceito de Efeito Indutivo como ferramenta metodológica, servindo enquanto conceito chave para entendimento dos demais conceitos na disciplina de Química no ensino médio, favorecendo uma aprendizagem significativa. O Efeito Indutivo é o conceito que explica como a distribuição de elétrons em uma ligação (e conseqüentemente em uma molécula) é afetada através da diferença de eletronegatividade entre os átomos participantes, para tal considerando efeitos de indução e interação eletrostática. A hipótese é que o modelo tradicional de ensino não atende mais às necessidades dos estudantes atuais, necessitando, assim, de abordagens pedagógicas mais dinâmicas e significativas. A pesquisa está sendo desenvolvida através da implementação de novas práticas pedagógicas a fim de melhorar a compreensão de Química e aumentar a participação dos alunos, tornando a aprendizagem envolvente, além de monitorar e avaliar o progresso dos alunos para determinar o impacto dessas novas abordagens.

Resultados e discussão

Nesta pesquisa, empregou-se uma metodologia mista, combinando análise de conteúdo e estatística para abordar aspectos qualitativos e quantitativos dos dados coletados. O foco da pesquisa é o Efeito Indutivo, sendo que materiais e literaturas já existentes foram investigados, bem como a criação de material de apoio autoral. Seis turmas do primeiro ano do ensino médio da Escola Estadual Bento Gonçalves, no município de Canoas, com aproximadamente 30 estudantes cada, participaram do presente estudo. Inicialmente, aplicou-se um questionário aos discentes para coletar informações sobre o entendimento do Efeito Indutivo e assuntos correlacionados. Adotou-se uma abordagem pedagógica inovadora para as turmas, utilizando tecnologia, jogos e

atividades interativas, bem como pesquisas bibliográficas e debates. A seguir, apresenta-se a relação de alunos e as notas que obtiveram no conjunto de atividades realizadas, que prestaram como parâmetros comparativos aos dados coletados nos questionários previamente aplicados.

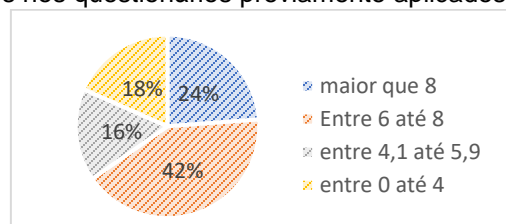


Figura 1. Relação de notas e da quantidade de alunos

Conclusões

Os resultados parciais indicam que a nova abordagem pedagógica, na qual o Efeito Indutivo atua como conceito chave e norteador dos demais, teve um impacto positivo no Ensino de Química. O engajamento dos alunos mostrou-se notavelmente superior, evidenciado tanto nas respostas aos questionários quanto na qualidade das discussões em sala de aula. Logo, a abordagem inovadora demonstrada neste projeto além de melhorar o entendimento do Efeito Indutivo e de outros conceitos químicos, promoveu um ambiente de aprendizado engajador e eficaz para os alunos.

Agradecimentos

PPSTEM-UERGS

Referencias e notas

- (1) KRIPPENDORFF, K. Content analysis: An introduction to its methodology. Sage Publications, 2012.
- (2) AUSUBEL, D. P. Aquisição e retenção de conhecimentos: uma perspectiva cognitiva. Lisboa: Plátano Edições Técnicas, 2003.
- (3) FREIRE, P. Pedagogia da Autonomia: saberes necessários à prática educativa. São Paulo: Paz e Terra, 2011.

Ciência Forense e Egito Antigo: Uma proposta de sequência didática para o ensino médio

Jeison Petersen¹ (IC)*, Morgana Zilse² (FM), Keysy Nogueira³ (PQ). petersenjeison@gmail.com

¹Universidade Federal de Santa Catarina – Campus Blumenau

Palavras Chave: *Ciência Forense, Egito Antigo, Papiloscopia, Sequência Didática, PIBID.*

Introdução

O ensinar Química de forma contextualizada é um dos desafios que os docentes enfrentam na tentativa de tornar o ensino significativo. A ciência forense, no contexto educacional, pode se tornar uma temática que possibilite um ensino contextualizado e multidisciplinar. Visto que, possibilitar o Ensino de Química utilizando a temática Ciência Forense torna o ensino ainda mais interessante e curioso para o estudante¹. Em relação ao exposto, a temática Química Forense no Ensino de Química é oportunizar e estimular a curiosidade, a pesquisa e, a busca de carreiras científicas e tecnológicas dos estudantes².

Nesse contexto, este resumo compartilha a estrutura e resultados de uma sequência didática de Química Forense implementada em uma escola estadual de Blumenau/SC, para estudantes do primeiro ano do ensino médio. A sequência didática objetivou propiciar aos educandos uma formação ativa e crítica por meio dos quatro momentos didáticos, a saber: Química Forense e Ciência no Egito Antigo, experimentação de papiloscopia e, aplicação e resolução de um estudo de caso. A proposta didática foi desenvolvida no subprojeto de Química do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação à Docência (PIBID), da Universidade Federal de Santa Catarina, Campus Blumenau.

Resultados e discussão

Os estudantes demonstraram interesse pela temática abordada e participaram ativamente da aula expositiva dialogada, principalmente nos momentos de identificação de pistas projetadas na forma de imagens, por meio de conjunto de slides. Responderam a dois questionários aplicados, realizaram a coleta da digital de colegas e a experimentação de revelação da digital a partir da sublimação do iodo, Figura 1. Considerando o exposto, acredita-se que abordar Química Forense foi uma abordagem temática que envolveu os estudantes, por meio de atividades contextualizadas e alinhadas com fenômenos químicos vivenciados por um perito criminal no dia a dia.



Figura 1. Revelação da digital através do iodo. Fonte: Elaborado pelos autores (2023).

Nos resultados identificou-se, que a proposta sequência de ensino despertou o interesse dos estudantes pelo estudo de Ciências e Química Forense. O que permitiu que experimentem e apliquem os conceitos teóricos aprendidos em sala de aula em situações reais, desenvolvendo habilidades e competências essenciais para a vida pessoal e profissional.

Conclusões

A sequência didática propõe a formação ativa e crítica dos estudantes por meio da experimentação e contextualização de conhecimentos químicos. Dessa forma, considera-se que a realização de experimentos didáticos, que ilustrem as técnicas utilizadas na análise de evidências químicas em casos criminais, pode levar os estudantes a compreenderem o trabalho de um perito e os conceitos químicos envolvidos na análise de um caso.

Referências e notas

- (1) MOLON, D. et al. Proposta de sequências didáticas utilizando a química forense nos conteúdos de química no ensino médio. 2020. 64 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Licenciatura em Química) - Universidade Sul de Santa Catarina, Tubarão/SC, 2020.
- (2) SEBASTIANY, Ana P. et al. Aprendendo a investigar através de uma atividade investigativa sobre Ciência Forense e Investigação Criminal. Revista Brasileira de Ensino de Ciência e Tecnologia. Ponta Grossa, v. 8, n. 4, set.-dez. 2015, p. 252-287, 2015.

Série de cinema “CSI Orgânica” como instrumento de aprendizagem

³Nicolas M. M. Barreto (IC), ³Camilly C. S. da Luz (IC), ³Carla R. Eising (IC), ⁴Natacha N. Biaotobock (IC), ¹Vanessa A. Matias (TC), ²Gabriel S. Jacinto (TC), ^{1,2,3}Albertina X. da R. Corrêa (PQ) *email: acorrea@univali.br

¹LaPeQ – multiusuário, UNIVALI, ²Laboratório de Química I UNIVALI, ³Curso de Engenharia Química, Escola Politécnica, UNIVALI, ⁴Curso de Ciências Biológicas, Escola de Ciências da Saúde, UNIVALI

Palavras Chave: Série de cinema, perícia criminal, química orgânica, interdisciplinar.

Introdução

Séries de cinema são recursos que diversificam a didática podendo ser ferramentas de ensino-aprendizagem. Principalmente, quando torna o discente sujeito agente do processo de aprendizagem¹, e mostram uma possível área de atuação profissional, como a prática em laboratório do perito criminal. Este projeto abordou o trabalho do perito criminal como questão norteadora da avaliação prática, onde os alunos da disciplina de química orgânica experimental, do curso de Engenharia Química da UNIVALI, atuaram como peritos analistas na identificação dos fármacos de uma cena de exame cadavérico.

Resultados e discussão

O projeto, denominado CSI Orgânica, consistiu em produzir uma série de episódios curtos que mostraram desde o encontro do corpo no local de óbito (indústria farmacêutica), passando por todas as etapas da cadeia de custódia de evidências até a entrega das amostras no laboratório “UniOrgânica”. Neste momento, os alunos no papel de peritos analistas (Figura 1), realizaram a identificação e caracterização das amostras coletadas (fármacos) de acordo com os conhecimentos adquiridos em aula teórica e prática como: extração com solvente, ponto de fusão, cromatografia de camada delgada (CCD) e espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR), finalizando então, com a entrega de um laudo pericial e uma avaliação da abordagem, como demonstrado na Figura 2.



Figura 1: Alunos realizando as práticas laboratoriais.

Como principais resultados obteve-se: os episódios disponibilizados no Instagram® @uni.orgânica, o relatório em forma de laudo pericial constando a identificação e caracterização de quatro fármacos (ibuprofeno, dipirona sódica, paracetamol e cafeína) e a avaliação do modelo de atividade proposta (Figura 3).

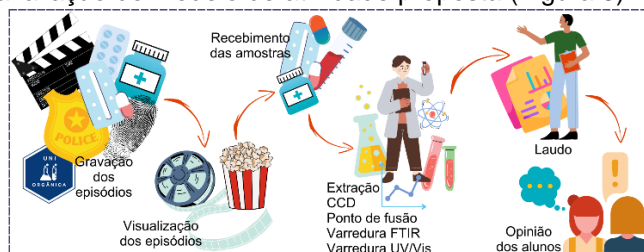


Figura 2: Fluxograma das etapas do CSI Orgânica.

Figura 3. Resultados obtidos com o projeto CSI Orgânica.

Conclusões

Constatou-se que houve interação dos alunos com os conteúdos práticos e teóricos abordados na dinâmica, resultando em participação ativa nas atividades experimentais. A atividade cumpriu o objetivo de mostrar uma possível área de atuação do Engenheiro Químico, a perícia criminal.

Agradecimentos

Luana Xavier da Rosa Corrêa, pela filmagem e edição dos episódios.

Referências e notas

- (1) Nogueira, T. J. A. M., Ataíde, K. M. N., Orsano, A. C. F., Lima, M. G. B. Educação em Debate. 2013-2016, 35-38,66-71.

Os professores formadores e a mobilização do CDC de licenciandos em Química

Charlene Barbosa de Paula*¹ (PG), Tavane da Silva Rodrigues¹ (PG), Bruno dos Santos Pastoriza¹ (PQ), Fábio André Sangiogo¹ (PQ). *xaxahdepaula@gmail.com

¹Universidade Federal de Pelotas, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Programa de Pós-Graduação em Química, Laboratório de Ensino de Química, Campus Universitário Capão do Leão.

Palavras Chave: *Conhecimento Didático do Conteúdo, Professor Formador, Ensino de Química.*

Introdução

Durante a formação inicial, os cursos de licenciatura podem ser compreendidos como um espaço formativo que permite a interação de licenciandos com professores formadores, na (re)construção de conhecimentos específicos da profissão, mediante o processo de mediação¹. Entre os conhecimentos específicos, destaca-se o Conhecimento Didático do Conteúdo (CDC), que é um elemento importante da ação do professor e, sobretudo, pela identidade que confere à profissão e ao desenvolvimento docente². Neste estudo foi analisada em uma turma de Estágio do curso de Licenciatura em Química da UFPel, com a participação de 7 licenciandos e dois professores (um titular e outro de estágio de docência). As aulas foram registradas em materiais gravados e escritos, e analisadas, com base na Análise Textual Discursiva a partir da categoria a priori que aborda as mobilizações do CDC (constituídos pelos disciplinar, metadisciplinar, psicopedagógico e contextual)^{2,3}. Nesse sentido, este trabalho busca evidenciar as mobilizações do CDC de licenciandos em Química, mediante a interação com professores formadores, no Estágio Supervisionado III.

Resultados e discussão

Devido ao limite de espaço, neste texto, analisam-se as respostas de dois licenciandos (L2 e L5), em especial, sobre a pergunta: “Avalie o componente curricular de Estágio Supervisionado III e a atuação dos professores”. Foi ressaltado por L5 que “As sugestões nos planos de aula e nos materiais toda semana foram fundamentais para o bom desenvolvimento das aulas”. O excerto de L5 ressalta ações que constituem atividades específicas ao componente de estágio de regência. Nelas, os licenciandos se tornam sujeitos de sua ação, através da reflexão sobre os planos de aula e os conteúdos a serem ensinados. Ainda, esta ação, sendo mediada pelos demais sujeitos envolvidos no processo formativo, como no caso dos professores formadores, ganha uma potência formativa por meio da ação coletiva da docência³. Na busca da qualificação da formação

docente os professores em formação também destacaram a autonomia em assuntos que faziam parte da docência, como destacado por L2: “Tivemos liberdade para discutir temas de interesse da turma, o que é muito importante, pois nunca temos a oportunidade”. Os professores formadores incentivavam que os licenciandos escolhessem temáticas para a discussão e qualificação da sua formação, abordando suas experiências como docente e valorizando seus conhecimentos prévios^{1,3}, propiciando a mobilização de seu CDC mediante intervenção, cooperação, estudo, análise e reflexão. Essas, entre outras narrativas e reflexões derivadas do estágio de regência eram sistematizadas e qualificadas nos relatórios, produzidos ao longo do semestre letivo.

Conclusões

Durante o estágio, os professores formadores buscaram a reflexão e a autonomia dos licenciandos, sendo um espaço propício à mobilização dos componentes do CDC e de movimentos na constituição docente, que viabilizam (trans)formações do CDC dos professores em formação inicial, evidenciadas mediante os processos de reflexão sobre suas ações, as concepções, os planejamentos e a *práxis*.

Agradecimentos

Ao apoio da CAPES- Código de Financiamento 001.

Referências

- (1) Araujo, O. H. A. O estágio como práxis, a pedagogia e a didática: que relação é essa?. *Revista Eletrônica de Educação*, **2020**, 14, e3096048.
- (2) Parga-Lozano, D. L.; Moreno-Torres, W. Conhecimento didático do conteúdo em química orgânica: estudo de caso de um professor universitário. *Educare*, **2017**, 21(3), p. 45-65.
- (3) Rufino, M. L.; De Paula, C. B.; Sangiogo, F. A.; Pastoriza, B. S.; Soares, A. C. A Coletividade do Conhecimento Didático do Conteúdo Químico no Contexto do Residência Pedagógica. *Revista Debates em Ensino de Química*, **2023**, 9(2), p.357-375.

Reatividade de joias utilizadas como adornos: análise de uma sequência didática.

Valdecir da Silva Junior (IC)^{1*}, Emily Karine dos Santos Silva (IC)¹, Fabiele Cristiane Dias Broietti (PQ)².
 valdecir.junior@uel.br

¹ Graduandos do Curso de Licenciatura em Química. Universidade Estadual de Londrina. Londrina, Paraná, Brasil

² Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina. Londrina, Paraná, Brasil

Palavras Chave: Estágio de regência, Eletroquímica, Reatividade, Metais.

Introdução

Os estágios supervisionados são considerados importantes espaços nos cursos de formação inicial, destinados às reflexões acerca da profissionalização docente, além de fortalecer parcerias com o ambiente escolar¹. Tendo em conta a carga horária mínima de 400h previstas nas diretrizes para a formação inicial de professores², os estágios podem ser organizados ao longo do curso enfatizando diferentes aspectos do contexto escolar, bem como do ambiente da sala de aula e as interações decorrentes dos processos de ensino e de aprendizagem¹. Neste trabalho, relatamos resultados de uma experiência de ensino elaborada e desenvolvida durante o estágio de regência. A Sequência Didática (SD)³ elaborada pelos licenciandos, com orientação da professora formadora, apresentou como temática a Reatividade de Joias e o conteúdo químico abordado foi eletroquímica, em especial os conceitos de oxirredução e os potenciais padrão de redução. A SD foi desenvolvida em uma turma de segundo ano de um colégio estadual em Londrina/PR seguindo os pressupostos da abordagem temática dos Três Momentos Pedagógicos⁴, caracterizada pela Problemática inicial, Construção do conhecimento e Aplicação do conhecimento.

Resultados e discussão

No Quadro 1 apresentamos atividades propostas em cada uma das etapas da SD.

Quadro 1: Atividades desenvolvidas.

Etapas	Descrição das atividades
1º MP	Problemática sobre infecções ocasionadas devido a perfuração de piercings utilizando joias de má qualidade; questões para explorar a situação-problema.
2º MP	Experimento que investiga a deposição de cobre, de uma solução de CuSO ₄ , em um prego. Nesta etapa os alunos foram divididos em grupos e orientados a tomarem notas do experimento por meio de produção escrita e/ou desenhos; abordagem do conteúdo científico.

3º MP	Retomada da questão problema inicial e discussão dos conceitos estudados e dados obtidos.
-------	---

No 1º MP, em 50% dos dados coletados foi mencionado que a causa da problemática é oriunda de questões biológicas, como a falta de higiene durante o processo de perfuração e, com as questões iniciais, foi possível identificar as concepções prévias dos estudantes a respeito da reatividade dos metais. No 2º MP, os estudantes, nos diferentes grupos, realizaram anotações acerca do experimento: ao mergulhar o prego na solução, foi observada a mudança da sua colocação devido a oxidação do ferro e deposição de cobre metálico. Com a abordagem científica, os alunos identificaram o agente oxidante e redutor da reação. Na retomada da questão problema no 3º MP, foi identificado que os alunos refutaram a ideia de que as infecções eram derivadas somente das ações biológicas e passaram a atribuir estas implicações ao material componente da joia, propondo soluções como o uso de joias menos reativas ou o revestimento do metal.

Conclusões

Ao final da SD, foi observado que houve indícios de desenvolvimento e ampliação do repertório conceitual por parte dos alunos uma vez que estes propuseram soluções acerca da problemática, utilizando-se para isto dos conceitos trabalhados em aula.

Referências e notas

- (1) Carvalho, A. M. P. Os Estágios nos Cursos de Licenciatura. São Paulo: Cengage Learning, 2012.
- (2) BRASIL. Conselho Nacional de Educação. Resolução CNE/CP n. 2, de 20 de dezembro de 2019. Define as Diretrizes Curriculares Nacionais para a Formação Inicial de Professores para a Educação Básica e institui a Base Nacional Comum para a Formação Inicial de Professores da Educação Básica (BNC-Formação). 2019.
- (3) ZABALA, A. A prática educativa: como ensinar. Porto Alegre, RS: Artmed, 1998. 224 p.
- (4) Delizoicov, D.; Muenchen, C. Os três momentos pedagógicos e o contexto de produção do livro "Física". Ciênc. Educ., Bauru, v. 20, n. 3, p. (617-638), 2014.

PLATAFORMA WHATSCHEM?

Maria Eduarda W. Rosa^{1*} (PID), Pedro Leardin¹ (PG), Cecília D. Flores¹ (PQ), Marisa Tsao¹ (PQ), Vanusa R. Lando¹ (PQ)

*maria.rosa@ufcspa.edu.br

¹Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre, Rua Sarmento Leite 245, Centro Histórico, Porto Alegre – RS.

Palavras Chave: Tecnologias da Informação e Comunicação, Ensino de Química, Objetos de aprendizagem, Química Verde.

Introdução

A crescente dificuldade no aprendizado da Química, evidenciada pela constante redução das notas médias no Exame Nacional do Ensino Médio (ENEM) na área das ciências da natureza, tem gerado uma demanda por alternativas e soluções inovadoras no campo educacional. Diante dessa realidade, a deficiência em Química não chega a ser um fator limitante para o ingresso no ensino superior, mas é um obstáculo importante na progressão até a integralização do curso. A “Plataforma WhatsChem?” (PW) foi concebida como resposta a esse desafio, com objetivo de fornecer um ambiente virtual de ensino destinado a auxiliar os estudantes que tenham disciplinas de Química em sua matriz curricular. A criação e desenvolvimento da plataforma visa estimular o estudo sistemático de Química, de forma inovadora de acesso e interação, com conteúdo aplicado ao cotidiano e com abordagens de química sustentável.^{1,2}

Resultados e discussão

A Plataforma WhatsChem? (PW) está organizada em tópicos que correspondem aos conteúdos de Química das disciplinas de Química Geral de cinco cursos da UFCSPA e seu acesso é realizado pelo Moodle através do cadastro dos alunos matriculados. Atualmente, a PW oferece quatro módulos de conteúdo: Soluções, Estequiometria, Ácidos e Bases, e, Eletroquímica. Cada módulo contém diversos Objetos de Aprendizagem (OA) projetados para tornar o ensino mais flexível, diversificado e interativo. Também incluímos conceitos de sustentabilidade e aplicamos princípios químicos à vida cotidiana dos alunos, relacionando os tópicos com os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS). Além disso, estão sendo produzidos vídeos sobre os conteúdos para aprofundar a compreensão conceitual dos alunos e tornar o aprendizado mais visual e envolvente na plataforma. Na PW, foram incorporados formulários de diagnóstico de conhecimento prévio (DCP), que tem

sido de grande importância na avaliação do progresso dos alunos e adaptação do conteúdo de acordo com suas necessidades específicas.

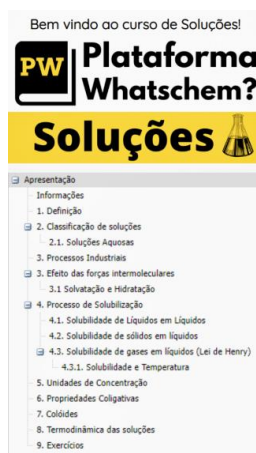


Figura 1. Layout do conteúdo de Soluções da Plataforma WhatsChem?

Conclusões

A Plataforma WhatsChem? (PW) tem sido utilizada como recurso auxiliar para os alunos em disciplinas de Química em diferentes cursos de graduação da UFCSPA para ajudar na compreensão do conteúdo e engajamento dos alunos. A PW é essencial para educação de qualidade, contribuindo para o alcance dos ODS.

Agradecimentos

Ao Programa de Iniciação à Docência da UFCSPA.

Referencias e notas

- (1) Henbest, G.; Mortezaei, K.; Alvelais, T.; Murphy, C.; Eichler, J. F. *Journal of Chemical Education*, **2020**, *97*, 4287.
- (2) Winssinger, J. E.; Visa, A.; Saha, B. B.; Matlin, S. A.; Mahaffly, P. G.; Kimmerer, K.; Cornell, S. *Journal of Chemical Education*, **2021**, *98*, 1061.

Júri Simulado com base em uma Questão Sociocientífica sobre o uso da Energia Nuclear como alternativa para amenizar o aquecimento global

Théo Lahorgue Roscoff (IC)*, Fábio André Sangiogo (PQ)¹ *qui.tlroscoff@outlook.com

¹Laboratório de Ensino de Química, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Universidade Federal de Pelotas, Campus Universitário Capão do Leão, s/n. CEP: 96160-000.

Palavras Chave: Questão Sociocientífica, Júri Simulado, Energia Nuclear.

Introdução

Um dos grandes objetivos atuais da área do Ensino de Ciências é a formação de cidadãos críticos e a superação de visões e concepções deformadas da Ciência por meio de sequências didáticas que envolvam a problematização das relações entre a Ciência, a Tecnologia, a Sociedade e o Ambiente (CTSA)^{1,2}. Dentre as propostas mais recentes no enfoque CTSA se encontra a abordagem de questões sociocientíficas (QSC), entendidas como temas controversos presentes na mídia que necessitam da mobilização de conceitos científicos para sua melhor compreensão e busca por possíveis soluções^{1,2}. As QSC são entendidas como uma expansão do movimento CTSA por possibilitarem o planejamento de atividades interdisciplinares que não só proporcionam o desenvolvimento de pensamento crítico dos estudantes e educadores, como também a habilidade de argumentação e o debate de questões morais, éticas, políticas e sobre a natureza da Ciência. Em vista disso, este trabalho traz o relato de uma atividade pensada a partir da abordagem de uma QSC² sobre o uso da energia nuclear como alternativa para amenizar o aquecimento global, a fim de promover a curiosidade epistemológica, a habilidade de argumentação e a formação de cidadãos críticos capazes de participar dos processos decisórios de suas comunidades locais ao relacionar diferentes saberes e conhecimentos científicos, tecnológicos, sociais e ambientais³. A atividade consiste em um jogo de interpretação de papéis de um júri simulado⁴ aplicado no contexto de um Estágio Supervisionado em uma escola de nível técnico do município de Pelotas, em uma turma do 1º ano do Ensino Médio. O júri envolveu o cenário hipotético da instalação de uma usina nuclear em Pelotas, e a turma foi dividida em três grupos: favorável, contrário e representantes da sociedade civil.

Resultados e discussão

Desde o momento em que a proposta foi apresentada aos estudantes, percebeu-se o grande interesse pela atividade, o que se materializou em seu empenho para o desenvolvimento de personagens próprios e até de uma empresa fictícia para a

instalação da usina. Previamente ao júri, cada grupo se organizou de tal forma que os estudantes apresentaram uma série de questionamentos a serem realizados aos colegas e a construção de argumentos embasados nos estudos realizados nas aulas e materiais de apoio fornecidos pelo professor. Conforme a discussão evoluía, o professor a mediava com o intuito de incentivar a participação de cada estudante e a discussão de certos aspectos da temática envolvendo os conteúdos trabalhados em aula sobre a estrutura atômica. Apesar disso, pouca intervenção do docente foi necessária devido à boa arguição entre os grupos que demonstraram uma boa organização entre seus membros, como na apropriação dos possíveis impactos sociais e ambientais associados às usinas nucleares. Alguns estudantes também trouxeram argumentos envolvendo questões econômicas relacionadas à geração de energia, além de demonstrarem uma preocupação com questões trabalhistas da população diretamente impactada pela usina. Ao final do júri, foi realizada uma votação que decidiu pela não instalação da usina em Pelotas considerando os impactos ao ecossistema e à população locais.

Conclusões

O júri simulado associado a uma questão sociocientífica proporcionou aos estudantes motivação, interesse e o desenvolvimento de habilidades argumentativas e de pensamento crítico, configurando um passo importante para a formação cidadã crítica^{2,3}.

Agradecimentos

Ao PROBIC/FAPERGS, à Escola e estudantes.

Referencias e notas

- (1) Pérez, L. F. M.; Lozano, D. L. P. *Góndola*, 8, 23, **2013**.
- (2) Pérez, L. F. M. *Cuestiones Sociocientíficas en la Enseñanza de las Ciencias: Experiencias investigativas e innovadoras*. Bogotá: INIIS, **2021**.
- (3) Delizoicov, D.; Angotti, J.A.; Pernambuco, M. *Ensino de Ciências: fund. e métodos*. São Paulo: Cortez, **2002**.
- (4) Oliveira, A.S.; Soares, M.H.F.B. *QNEsc*, 21, 18, **2005**.

Movimento de inserção da inovação em química no contexto escolar

Paola Bork Abib¹ (PG)*, Flávia Moura de Freitas² (PG), Fábio André Sangiogo³ (PQ). *paola02bork@gmail.com

^{1,2,3} Universidade Federal de Pelotas, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Programa de Pós-Graduação em Química, Laboratório de Ensino de Química, Campus Universitário Capão do Leão, s/n. CEP: 96160-000.

Palavras Chave: Ensino de Química, Conhecimento Científico, Conhecimento Escolar.

Introdução

Corroboramos com a perspectiva de que existem distintas formas de conhecimento¹, e que por meio de inter-relações e transformações dinâmicas entre eles, promovemos a construção do conhecimento escolar. Nesse processo, ocorrem mediações didáticas do conhecimento científico pela escola e professores¹. Promover um maior entendimento sobre a produção científica, tornando-a acessível aos estudantes, pode contribuir para a formação de cidadãos mais críticos e reflexivos, os integrando com o mundo atual, com as inovações e avanços da Ciência e Tecnologia (C&T)². A inovação pode ser compreendida como criação, reformulação, readequação, produzindo a introdução de novidade à um determinado produto, processo ou método, a fim de atribuir melhorias ao sistema, é muito importante para o desenvolvimento da C&T³. Nesse sentido, torna-se importante analisar como as inovações e o conhecimento científico impactam o contexto escolar. O objetivo deste trabalho é relatar um contexto, bem como potencialidades e dificuldades encontradas em realizar a articulação entre a inovação, o conhecimento científico da Química e o conhecimento químico escolar. No estudo são analisadas as ações do Programa Institucional de Bolsa de Iniciação à Docência (PIBID) da Química, da UFPel, em atividades que buscam inserir o conhecimento inovador advindo da Ciência Química no contexto escolar.

Resultados e discussão

O PIBID torna viável a aproximação entre universidade e escola, podendo contribuir na formação de professores e estudantes de diferentes níveis de ensino, ao ponto em que se mostra como um espaço de reflexão em grupo⁴. Nesse contexto, uma estudante de doutorado e licenciandos em Química - membros do PIBID, foram convidados a participar de reuniões em que ocorriam seminários de apresentação de temas e trabalhos dos pesquisadores do grupo LaCoPol – Laboratório de Tecnologia e Desenvolvimento de Compósitos e Materiais Poliméricos da UFPel. O intuito era melhor compreender sobre as pesquisas inovadoras desenvolvidas pelo grupo e de alguma forma, realizar o processo de didatização¹ desse conhecimento para o contexto escolar. Em meio ao cenário, e com base nas

anotações em diário de bordo, pode-se destacar algumas das potencialidades que foram observadas: a maior curiosidade dos licenciandos do PIBID sobre metodologias, equipamentos laboratoriais, temas e até mesmo conceitos de Química relacionados à área de pesquisa do grupo no qual participavam. Isso também demandou um grande esforço na busca de associar conceitos avançados desenvolvidos pela pesquisa em Química, com conteúdos que poderiam ser discutidos à nível do Ensino Médio, considerando a necessidade da contextualização junto aos estudantes da escola. Também se observou a grande dificuldade em realizar a articulação de conhecimentos, devido à baixa carga-horária de Química na escola e a necessidade de inserir outros conteúdos/conceitos, como adsorção, polímeros, e outros, que muitas vezes não estão no cronograma do professor, mas que possibilitariam um melhor entendimento sobre a pesquisa científica inovadora.

Conclusões

A pesquisa convida ao movimento de reflexão com relação aos conteúdos e conceitos de Química que são ou não viáveis de serem abordados no Ensino Médio. Ao assumir a perspectiva de construir e desenvolver um ensino pautado no atual cenário, repensar conceitos ensinados, considerando o avanço científico, é necessário. Nesse caso, a rede de apoio aos professores, via interação universidade e escola, pesquisadores, professores e estudantes, torna-se fundamental para contribuir com a mediação do conhecimento químico escolar.

Agradecimentos

À Capes (001), ao CNPq e à FAPERGS.

Referencias e notas

- (1) Lopes, A. C. *Química Nova*. **1997**, 20, 568.
- (2) Santos, W. L. P., Mortimer, E. F. *Ensaio – Pesquisa em Educação em Ciências*. **2002**, 2, 23.
- (3) Capes. *Ministério da Educação*. **2019**.
- (4) Nogueira, K. S. C.; Faria, F. L. *Revista Debates em Ensino de Química*. **2023**, 9, 391.

Experimentação investigativa: Uma nova perspectiva para o futuro da química.

MARIA EDUARDA BATISTA TEIXEIRA (IC)*, FÁBIO ANDRÉ SANGIOGO (PQ), BRUNA ADRIANE FARY (PQ), DIOGO LA ROSA NOVO (PQ)**

*maria-ebteixeira@educar.rs.gov.br; **diogo.la.rosa@hotmail.com

Universidade Federal de Pelotas, Laboratório de Ensino de Química, Campus Universitário Capão do Leão.

Palavras Chave: Experimentação investigativa, Ensino de Química, Oficina de Ciências Químicas.

Introdução

A experimentação investigativa se mostra uma nova perspectiva para o Ensino de Química, integrando estudantes ao âmbito do conhecimento científico de maneira a desenvolver autonomia em sala de aula¹. Sob essa ótica, faz-se imprescindível os docentes como mediadores no processo educacional². Assim, uma oficina foi organizada por estudantes do curso de Licenciatura em Química da Universidade Federal de Pelotas participantes do Programa Institucional de Iniciação à Docência (PIBID) Química. A oficina interdisciplinar envolveu também acadêmicos do curso de Física e docentes de uma escola municipal de Pelotas/RS. O trabalho buscou desenvolver uma prática de experimentação investigativa com vistas à novas metodologias para o Ensino de Química. Diante disso, esse trabalho tem como objetivo relatar a realização de uma aula experimental investigativa intitulada “Crime no Laboratório”.

Resultados e discussão

O PIBID Química propôs uma oficina de ciências para que os alunos investigassem um “Crime no Laboratório”. A oficina foi composta por três etapas até que o assassino do crime fosse descoberto. A primeira delas foi a identificação de pH, a segunda a identificação do sangue com luminol e a terceira a identificação das impressões digitais. A oficina recebeu duas turmas do primeiro ano do ensino médio. A primeira foi dividida em três grupos e a segunda em quatro grupos. Os dois grupos da primeira turma encontraram o assassino e apenas um grupo não encontrou o assassino correto, e a segunda turma todos os grupos acharam o assassino. A descoberta do assassino se deu por meio de algumas pistas e experimentos. Havia seis suspeitos do crime: o faxineiro, o segurança, a professora de química, a técnica de química, o bibliotecário e o professor de física. Na Figura 1 é apresentado os estudantes colhendo amostras e determinando o pH de algumas substâncias comuns no seu dia a dia para ver qual caráter da solução deixada pelo assassino (ácido, base ou neutro). Na segunda parte da oficina, os estudantes após discutirem algumas hipóteses foram para o

laboratório de química procurar mais pistas sobre o assassinato, no qual então encontrou-se uma folha que o assassino deixou pelo caminho. Após identificar a impressão digital presente, descobriu-se o responsável, comparando as digitais referentes à cada suspeito. Na última etapa puderam concluir suas hipóteses e assim, “resolver” o crime, identificando a impressão digital do assassino, que foi realizada com pó de carvão e a gordura presente na mão, concluindo então, que o responsável pelo crime era o bibliotecário.



Figura 1. Estudantes realizando a análise do pH com repolho roxo.

Conclusões

A realização da oficina de ciências químicas com o tema proposto “Crime no Laboratório” caracterizou-se como um espaço em que os discentes desenvolveram a criatividade, autonomia, práticas e construção do conhecimento químico. Em suma, este foi um meio educativo com extremo interesse e desenvoltura dos participantes, realizando as atividades com entusiasmo e curiosidade pelos experimentos de Química.

Agradecimentos

Ao PIBID e a CAPES.

Referências e notas

- (1) TAHA, Marli Spat et al. Experimentação como ferramenta pedagógica para o ensino de ciências. **Experiências em ensino de ciências**, v. 11, n. 1, p. 138-154, 2016.
- (2) SANTOS, Wildson Luiz Pereira dos; MORTIMER, Eduardo Fleury. Tomada de decisão para ação social responsável no ensino de ciências. **Ciência & Educação (Bauru)**, v. 7, p. 95-111, 2001.

Um xampu neutro é o melhor para os cabelos? Análise de uma proposta experimental para o ensino de Química

Emily Karine dos Santos Silva¹ (IC)*, Valdecir da Silva Junior (IC)¹, Fabiele Cristiane Dias Broietti (PQ)²**emily.karine.santos@uel.br*

¹Graduanda(o) do curso de Licenciatura em Química, Universidade Estadual de Londrina (UEL)

²Docente do curso de Licenciatura em Química, Universidade Estadual de Londrina (UEL)

Introdução

As atividades experimentais são consideradas uma estratégia didática promissora, pois oferecem um ambiente favorável para abordar as diferentes extensões do conhecimento científico¹. A modalidade da experimentação investigativa caracteriza-se por partir de situações problemas do cotidiano dos alunos, permitindo que expressem suas ideias prévias, de modo que estas possam ser discutidas e relacionadas aos aspectos científicos em debate. Por meio das atividades experimentais, das discussões, das hipóteses levantadas e da busca por solucionar os problemas apresentados, os alunos são incentivados a desenvolver habilidades para a sua formação como cidadão². Na perspectiva de trabalhar com atividades experimentais investigativas desenvolveu-se uma aula para abordar conceitos de reações de saponificação considerando a temática dos xampus. A aula foi ministrada em uma disciplina do quarto ano do curso de Licenciatura em química, em uma situação de microensino³. Desse modo, o objetivo deste trabalho consiste em analisar os resultados obtidos a partir da proposta experimental desenvolvida.

Resultados e discussão

No Quadro 1 descrevemos as atividades desenvolvidas durante a execução do microensino.

Quadro 1: Atividades elaboradas

Etapas	Descrição das atividades
Situação Problema	Problemática baseada na leitura de rótulos de xampus e questionamento se um xampu neutro seria o ideal para os cabelos.
Procedimento Experimental	Discussão de questões pré-experimento, confecção de xampu artesanal e investigação do pH deste e de outros xampus comerciais.
Construção de explicações	Discussão dos dados obtidos. Abordagem do conteúdo científico. Retomada da problemática e aplicação de questões pós-experimento.

Durante a problemática, foi evidenciado que os estudantes não possuíam uma noção clara sobre a influência do pH nos xampus e, com as questões pré-experimento, que buscavam verificar a influência do pH no xampu e seu mecanismo de limpeza, foi observado que os estudantes possuíam conceitos prévios sobre a ação do xampu, no qual houve a comparação do seu mecanismo de limpeza com a do sabão. Durante o experimento, os estudantes se mostraram interessados no preparo do xampu artesanal a fim de investigar o pH do produto final. Na última etapa foi possível notar que, de maneira geral, houve indícios de aprendizagem uma vez que, ao comparar as respostas iniciais e finais acerca da problemática, observou-se que os conceitos principais – a formação de micelas e como elas contribuem para a limpeza dos cabelos, juntamente com a explicação do pH e como ele afeta a saúde capilar – foram compreendidos pelos alunos.

Conclusões

O tema xampu é instigante para abordar conceitos de reações de saponificação e seus mecanismos. Por sua vez, a atividade experimental investigativa é uma estratégia promissora, uma vez que esta tende a favorecer o protagonismo do aluno. Além disso, essa atividade promoveu a exploração do conhecimento químico de maneira a facilitar a aprendizagem e, ao mesmo tempo buscou estabelecer conexões significativas com o cotidiano.

Referencias

- (1) OLIVEIRA, J. R. S. Contribuições e abordagens das atividades experimentais no ensino de ciências: reunindo elementos para a prática docente. *Acta Scientiae*, Canoas, v.12, n.1, p. 139- 153, jan./jun. 2010.
- (2) ALMEIDA, Fernanda Garcia de; BROIETTI, Fabiele Cristiane Dias; ARRIGO, Viviane; ASSAI, Natany Dayani de Souza. Integração entre o método Jigsaw e a experimentação investigativa para o estudo de cinética química. *Revista da Sociedade Brasileira de Ensino de Química*, 02, n. 1, 2021.
- (3) COSTA, S. L. R.; BROIETTI, F. C. D. Potencialidades do microensino reflexivo na formação Inicial de professores de Química. *Revista Docência do Ensino Superior*, Belo Horizonte, v. 11, p. 1-19, 2021.

Relato de aula investigativa para ensino de química: “Investigando como tirar óleo do mar”

Júlia Bonow Haertel Barneche (IC)*, Natália Maiquele Dalamann Maron (IC), Bruna Adriane Fary (PQ), Diogo La Rosa Novo (PQ)**.

*juliabarneche@gmail.com; **diogo.la.rosa@hotmail.com

Universidade Federal de Pelotas, Laboratório de Ensino de Química, Campus Universitário Capão do Leão.

Palavras Chave: *Aula Prática Investigativa, Experimentação, Misturas.*

Introdução

Para que os estudantes reflitam sobre o que estão fazendo, o experimento deve ultrapassar a concepção experimentação pela experimentação, que tendem a ser um cronograma onde os alunos apenas reproduzem o que está escrito, atividades como estas tem baixo poder cognitivo. (SUART, MARCONDES, 2008). A partir disso, a experimentação é uma ferramenta para os estudantes interligarem os fenômenos visíveis com os fenômenos teóricos.¹ Assim, aspectos investigativos são importantes permitindo a participação ativa no processo de ensino e aprendizagem.² O grupo do Programa Institucional de Iniciação à Docência (PIBID) Química da UFPel vem elaborando roteiros de experimentação investigativa. Assim, este trabalho tem como objetivo relatar uma atividade experimental investigativa em uma escola pública de ensino médio de Pelotas/RS.

Resultados e discussão

Os estudantes do 1º ano da disciplina eletiva de práticas de laboratório da escola pública municipal Pelotense foram indagados: Como retirar o óleo do mar em caso de um vazamento? As primeiras hipóteses foram: “iria colocar fogo no óleo, aí fica só água”, “usar uma simples corda com sabão, deve conter o óleo e isso facilitaria a remoção do óleo”. Alguns concordaram, outros apontaram que a queima do óleo iria gerar ainda mais poluição, e uma corda com sabão não seria o suficiente para barrar esta quantidade de óleo. Os eles foram separados em 4 grupos recebendo um béquer com terra, água salgada, óleo e uma folha. Inicialmente foi solicitado aos estudantes focarem a luz da lanterna dos celulares na amostra, observaram que a luz não ultrapassava o óleo e não chegava na folha. Os estudantes concluíram que o óleo prejudica a fotossíntese de plantas aquáticas. Os pibidianos indagaram a busca de formas para separar o óleo, a água e a areia, disponibilizando vidrarias. Os estudantes a princípio compreenderam que a água e o óleo não se misturavam, e que o óleo ficava sob a água, mas não relacionaram isso a polaridade ou densidade. Alguns grupos tiveram dificuldade em compreender que a areia

era mais densa que a água, logo tiveram receio em depositar a água e o óleo no funil de decantação/papel filtro pois acharam que a areia atrapalharia o processo de separação. Após isso, entenderam que apenas a parte líquida seria retirada. Os grupos escolheram papel filtro, funil de decantação ou ambos, e alguns grupos começaram com uma técnica e finalizaram com outra. Os resultados estão apresentados de maneira resumida no quadro 1.

Quadro 1: Métodos usados pelos grupos:

grupo	Material usado 1	Material usado 2	Resultado obtido
1	Funil de decantação	//	Água com moderados resquícios de óleo
2	Papel filtro	//	Água com muitos resquícios de óleo
3	Funil de decantação	Papel filtro	Água limpa/muito pouco resquício de óleo
4	Funil de decantação	//	Água com poucos resquícios de óleo

^a O grupo 3 após fazer a decantação passou a água pelo papel filtro para ter certeza de que estaria mais limpa, o grupo que usou apenas o papel filtro acabou cometendo erro e deixando muito óleo passar junto com a água.

Conclusões

Diante do relato se pode perceber a importância da experimentação investigativa em sala de aula. Na experimentação investigativa os estudantes aumentam a capacidade cognitiva e lógica criando hipóteses e refletindo sobre seus objetivos.

Agradecimentos

PIBID, UFPEL, CAPES, Colégio Municipal Pelotense e LABEQ

Referencias e notas

- (1) SUART, E.C. et al., *Revista Brasileira de Pesquisa em Educação em Ciências*, v. 8, n. 2, 2008.
- (2) PRSYBYCIEM, M.M. et al., *Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias*, v. 17, n. 3, p. 602-625, 2018.

A Inovação Científica e Tecnológica na Formação de Profissionais em Química

Flávia Moura de Freitas¹ (PG)*, Paola Bork Abib² (PG), Fábio André Sangiogo³ (PQ). *fmouraf@outlook.com

^{1,2,3} Universidade Federal de Pelotas, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Programa de Pós-Graduação em Química, Laboratório de Ensino de Química, Campus Universitário Capão do Leão, s/n. CEP: 96160-000.

Palavras Chave: Ensino Superior, inovador, formação inicial, legislação

Introdução

Há 20 anos foram apontados eixos mobilizadores em Química¹ sobre as mudanças no Ensino Superior no Brasil e pós-graduação e sobre quais seriam as perspectivas para a Química e, posteriormente, desenvolveu-se uma retrospectiva² quanto ao estudo anterior, ampliando as discussões quanto ao panorama futuro para a Química. Nesse contexto, a inovação esteve presente nessas discussões quanto ao desenvolvimento da área, inclusive em 2004 ao ser sancionada a Lei da Inovação³, o qual traz inovação como “introdução de novidade ou aperfeiçoamento no ambiente produtivo e social que resulte em novos produtos, serviços ou processos ou que compreenda a agregação de novas funcionalidades”³. O presente estudo, a partir de uma análise documental, objetivou compreender o que trazem os documentos que legislam a Educação Superior sobre a inovação e as possíveis implicações à formação de profissionais da Química. Através da metodologia de análise textual discursiva⁴ emergiram três categorias: 1) Inovação Curricular no Ensino Superior; 2) Inovação Profissional: ações na atuação docente; e a categoria discutida neste texto: 3) Inovação científica e tecnológica na construção dos conhecimentos Químicos.

Resultados e discussão

Apenas 4 dos 17 documentos analisados mencionam a terminologia “inova”, o que indica a não preocupação em atualização sobre o conceito ou as implicações com a inovação na formação dos químicos. A categoria 3 aponta as questões que envolvem o desenvolvimento da Ciência, Tecnologia e Inovação (CT&I) na formação de sujeitos, possibilitando ações críticas e de tomada de decisão frente a questões socioambientais e tecnológicas a nível de transformação do conhecimento Químico. O documento Diretrizes e Projetos Pedagógicos para os Cursos de Química destaca quanto as adversidades encontradas nos processos formativos na universidade: “(...) *diante da velocidade com que as inovações científicas e tecnológicas vêm sendo produzidas e necessariamente absorvidas (...)*”. Nesse contexto, em relação a formação dos professores universitários, compreende-se que grande parte do

desenvolvimento da CT&I passa por estes profissionais, que contribuem para a produção científica e também na formação de novos profissionais⁵, como menciona o documento das Diretrizes Curriculares Nacionais para a formação inicial em nível superior: “(...) *inerentes à sólida formação científica e cultural do ensinar/aprender, à socialização e construção de conhecimentos e sua inovação, em diálogo constante entre diferentes visões de mundo*”. Em suma, compreende-se a inovação científica e tecnológica na construção dos conhecimentos Químicos, valorizando os profissionais em Química, que compõe a Universidade e fazem dela um espaço colaborativo, de construção, de reformulação e de incentivo a formação de profissionais mais qualificados, no contexto da sua prática, na docência e/ou pesquisa, e articulando as ações que mobilizam universidade e sociedade^{2,6}.

Conclusões

Os documentos legislativos necessitam de ajustes frequentes para acompanhar as mudanças e promover o desenvolvimento da área e a capacitação desses profissionais. É importante que órgãos de financiamento e organizações, como o Conselho Federal de Química (CFQ), realizem essas reformulações para incentivar o avanço da CT&I em setores além da academia, contribuindo para a produção do conhecimento químico e a formação dos profissionais da área⁶.

Agradecimentos

À Capes (001), ao CNPq e à FAPERGS.

Referencias

- (1) Andrade, J.B; Cadore, S; Vieira, P. C; Zucco, C; Pinto, A. C. Química Nova, 26, 3, 445-451, 2003.
- (2) Guarieiro, L. L. N; Pereira, P. A. P; Vieira, P. C; Lopes, N. P; Andrade, J. B. Química Nova, v. 41, n. 10, p. 1226-1236, 2018.
- (3) BRASIL. Lei nº 10.973. MCT, Brasília, 03 Dez. 2004.
- (4) MORAES, R; GALIAZZI, M.C. 2.ed. Ijuí: Unijuí, 2011.
- (5) Andrade, J.B; Cadore, S; Vieira, P. C; Zucco, C; Pinto, A. C. Química. Nova. 2004, 27, 358.
- (6) MACHADO, S. P; CORTES, C. E. S; ALMADA, R. B. Química Nova, v. 46, n. 1, 126-130, 2023.

Um olhar para a Ciência através dos Textos de Divulgação Científica

Bruna Gabriele Eichholz Vieira (PG)^{1*}, Roger Bruno de Mendonça (IC)², Alessandro Cury Soares (PQ)³, Bruno dos Santos Pastoriza (PQ)⁴.

bruna.gabriele.22@gmail.com

^{1,2,3,4} Laboratório de Ensino de Química, Universidade Federal de Pelotas. Campus Capão do Leão, Centro de Ciências Químicas Farmacêuticas e de Alimentos. CEP:96160-000.

Palavras-chave: Divulgação Científica; TDC; Ensino de Química;

Introdução

Os Textos de Divulgação Científica (TDC) são recursos que permitem a apropriação da linguagem da ciência a partir do "emprego de analogias, generalizações, aproximações, comparações, simplificações" (ZAMBONI, 2001, p. 89). Sendo assim, os TDC podem assumir potencialidades que variam considerando as características e finalidades de sua divulgação (BUENO, 2010). Portanto, este trabalho, tem como objetivo apresentar considerações sobre o uso de TDC e qualificar as compreensões acerca das possibilidades e inferências de seu uso no ensino formal (contexto escolar).

Resultados e discussão

A DC apresenta uma gama de possibilidades, que vão desde divulgar os conhecimentos científicos produzidos na academia como também, fazer com que públicos que não tenham contato com a ciência possam se interessar pelo assunto, ou ainda se apropriar dos conhecimentos. Portanto, foi realizada uma revisão bibliográfica a partir do Portal Periódicos da CAPES, onde buscamos os artigos a partir das palavras-chaves "divulgação científica" e "química" entre os anos de 2000 e 2022. Nesta busca, foram encontrados 29 artigos que apresentavam diversas ferramentas que são utilizadas pela Divulgação Científica, dentre essas a experimentação, teatro, *podcasts*, TDC, museus. A partir disso, buscamos analisar como os artigos encontrados abordam e discutem a utilização de cada ferramenta, e para este trabalho, iremos discutir sobre os TDC. Foi possível observar três direcionamentos. O primeiro refere-se às possibilidades da utilização de textos já encontrados na literatura, como por exemplo as revistas "Superinteressante" e "Pesquisa FAPESP". Outra possibilidade abordada pelos artigos é da retextualização (MARANDINO, 2004), com o intuito de adequar um texto que tem como foco um público especializado para um público não especializado. A terceira possibilidade seria da construção didática, a qual o professor busca através dos TDC, relacionar a

informação científica que ele contém com algum conceito/conteúdo que queira abordar em sala de aula.

Conclusões

O uso de TDC se caracterizam como um caminho para aproximar os estudantes de temáticas científicas, que são apresentadas nos textos de forma dinâmica e contextualizada. A partir dos TDC, é possível que os estudantes se apropriem dos termos científicos a partir da mediação realizada pelos professores. Ainda, é possível destacar que alguns TDC não vão de acordo com a linguagem que circula o âmbito escolar, e para isso, se utiliza da retextualização, onde é feito este processo de (re)significar a linguagem científica. Esse processo de retextualização pode ser feito pelos estudantes e a partir disso eles irão construir, conscientemente, um sentido para os termos científicos, levando a sua significação. Isso se torna possível a partir das abordagens e do contexto no qual o TDC é utilizado, da sua linguagem específica, que estabelece relações entre conceitos cotidianos e científicos, e do planejamento do professor.

Agradecimentos

A CAPES pelo apoio financeiro, a Universidade Federal de Pelotas e ao Laboratório de Ensino de Química (LBEQ).

Referências e notas

- (1) BUENO, W. C. Comunicação científica e Divulgação Científica: aproximações e rupturas conceituais. *Revista Informação & Informação*, **2010**, 15,1-12.
- (2) ZAMBONI, L. M. S. *Cientistas, jornalistas e a divulgação científica*. Campinas: Autores Associados, **2001**.
- (3) MARANDINO, M. Transposição ou recontextualização? Sobre a produção de saberes na educação em museus de ciências. *Revista Brasileira de Educação*, **2004**, 26.

Arte e o Ensino de Química: potencialidades e perspectivas para a valorização das artistas pelotenses

Muriel B. Pereira¹(PG), Bruna A. Fary²(PQ)

muriel.belo@hotmail.com

1,2 Universidade Federal de Pelotas

Palavras Chave: *interdisciplinaridade, ensino, arte, artistas, química, pelotenses*

Introdução

Faz-se necessário estudar Química, pois ela é uma ciência que está presente no nosso cotidiano e estudá-la pode proporcionar um desenvolvimento intelectual de compreender e reconhecer aspectos químicos no cotidiano, reconhecendo que a Química é uma ciência que está presente na base do desenvolvimento econômico, por exemplo, na indústria das artes e na indústria da informática. Além disso, ela é importante para formação de um cidadão, pois torna ele crítico, contribuindo para a construção do pensamento científico. O futuro da humanidade depende de como será utilizado o conhecimento químico (1). Nesse sentido, se busca no campo dos estudos de Ensino de Química estudar metodologias ou abordagens educacionais que possibilitem buscar por processos de ensino e aprendizagem significativos para os estudantes. Nessa perspectiva, uma das formas é de contextualizar a Química utilizando algo contemporâneo, sendo um exemplo a arte, considerando que (2), mencionam: “[...] arte quer criar um finito que restitua o infinito: traça um plano de composição que carrega por sua vez monumentos ou sensações compostas, sob a ação de figuras estéticas”. Com isso, esse trabalho aponta para algumas potencialidades e perspectivas para valorização de artistas mulheres pelotenses, se utilizando da relação interdisciplinar entre a arte e o Ensino de Química.

Resultados e discussão

Quando ampliamos o olhar para a arte, percebemos suas potencialidades dela para o Ensino de Química, porém a articulação de Química e arte não é algo inovador, mas a forma que pode-se articular que se difere. Esta relação possibilita trabalharmos com uma perspectiva de ensino e aprendizagem baseada na interdisciplinaridade. Pensando na interdisciplinaridade como um eixo pelo qual a prática pedagógica se conduz, sendo mais um processo do que um produto (3). A

relação entre as duas possibilita utilizarmos, por exemplo, obras artísticas de artistas locais, seja ele de gênero masculino ou feminino, mas para ampliarmos o olhar, podemos pensar em artistas femininas, a qual pode-se articular com gênero, com finalidade de valorizar os artistas mulheres locais, dando visibilidade a sua produção e sua história, além de ser um meio de se abordar interligar-se a conteúdos químicos.

Conclusões

Nesse sentido, as relações que são estabelecidas entre arte e Química para valorização de artistas pelotenses são base de pesquisa de mestrado de uma estudante do PPGQ- UFPel. Esse é vinculado a um projeto interdisciplinar chamado como “Valorização da Produção Artística Feminina por Meio da Ciência: As Artistas Mulheres da Escola de Belas Artes de Pelotas”, que tem como finalidade relacionar diferentes cursos da UFPel, e espera-se ao final do projeto responder algumas questões, que são elas: Quem eram essas mulheres? E onde estão suas obras?.

Agradecimentos

Agradeço a oportunidade de estar inserida no Mestrado do PPGQ- UFPel e ao órgão de fomento CNPQ, pela bolsa disponibilizada para realizar minha pesquisa.

Referencias e notas

- (1) Silva, E. P. Silva, L. P. G. A.; Lima, K. E. B.; Lima, K. E. B.; Dudu, R. E. I. S.; Brito, V. V. O ensino de química na construção da cidadania, 49º Congresso Brasileiro de Química, Porto Alegre, 2009.
- (2) Deleuze, G; Guattari, F. O que é Filosofia? São Paulo: Editora 34, 1992.
- (3) Fazenda, I. C. A.. Interdisciplinaridade: história, teoria e pesquisa. 18. ed. Campinas: Papyrus, 2012. 143 p.