

2017

5º Encontro de Química da UFPB

Formação dos profissionais de Química:
Novos Desafios Para Novos Tempos
Campus I - João Pessoa/PB
25 a 28 de Setembro de 2017



REALIZAÇÃO



LIVRO DE RESUMOS





5º Encontro de Química da UFPB

*Formação dos Profissionais de Química:
Novos Desafios para Novos Tempos*

*Campus I- João Pessoa/PB
25 a 28 de Setembro de 2017*

Auditório da Reitoria

O Departamento de Química da UFPB tem a honra de convidá-lo a participar do 5º Encontro que será realizado no período de 25 a 28 de setembro de 2017, no Auditório da Reitoria do Campus I da instituição e no próprio departamento.

O 5º Encontro tem como tema “Formação dos Profissionais de Química: Novos Desafios para Novos Tempos” que expressa, antes de tudo, o ensejo por uma formação acadêmico-profissional dos estudantes crítica, reflexiva e contemporânea. No cenário atual, o profissional da Química se depara com um mercado de trabalho cada vez mais globalizado e exigente em termos de eficiência, produtividade e competitividade. Tudo isso requer do Químico, além da formação sólida e crítica, uma qualificação permanente e familiarização das novas pesquisas e tecnologias que surgem constantemente.



UFPB

Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Departamento de Química

Comissão Organizadora

Coordenador: Prof. Dr. Wallace Duarte Fragoso

Vice-Coordenadora: Prof.^a Dra Ilda A. S. Toscano

Prof. Dr. Claudio Gabriel Lima Júnior

Prof. Dr. Edvan Cirino da Silva

Prof. Dr. Fausthon Fred da Silva

Prof.^a Dra. Gabriela Fehn Fiss

Prof.^a Dra. Kátia Messias Bichinho

Prof.^a Dra. Liliana de F. Bezerra Lira de Pontes

Prof.^a Dra. Rafaela Bernardo Provazi Pesci

Prof. Dr. Sávio Moita Pinheiro

Comissão Científica

Prof. Dr. Edvan Cirino da Silva

Prof. Dr. Claudio Gabriel Lima Junior

Prof.^a Dra. Karen Cacilda Weber

Prof. Dr. Silmar Andrade do Monte

Prof. Dr. Ricardo Alexandre Cavalcanti de Lima

Profa. Dra. Antônia Lúcia de Souza



Síntese e análise conformacional de derivados *N*-acilidrazônicos

Gleyton Leonel S. Sousa¹(PG)*; Jamire Muriel da Silva¹(PG); Willian Charles da Silva Moura¹(PG); Mércia Amaro da Costa¹(IC); Sonaly Lima Albino¹(IC); Ricardo Olimpio de Moura¹(PQ).

¹Universidade Estadual da Paraíba, Campina Grande, PB, Brasil; *gleytonleonel@gmail.com

Palavras Chave: Modelagem molecular. Conformeros. Cianoacetohidrazida.

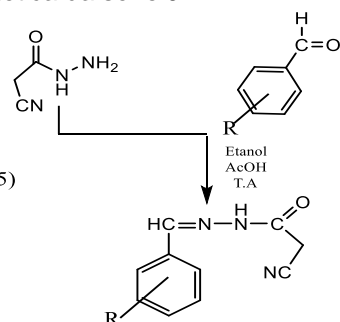
Introdução

A Análise Conformacional é o estudo da variação de energia que a molécula sofre com os grupos girando em torno de uma ligação simples¹. Um método de se investigar a conformação mais estável de uma molécula é através dos cálculos da mecânica molecular, a fim de se entender como forças intramoleculares tornam alguns arranjos espaciais mais favoráveis energeticamente do que outros². Este trabalho se objetivou na síntese e análise conformacional de derivados *N*-acilidrazônicos.

Resultados e Discussão

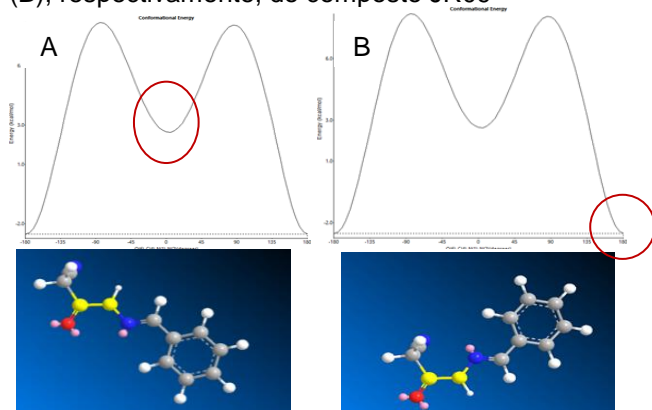
Esquema 1: Rota sintética da série JR

R = 2-nitro (JR-05)
R = 4-cloro (JR-06)
R = 4-nitro (JR-08)
R = Hidrogênio (JR-09)
R = 4-metoxi (JR-11)
R = 4-dimetilamino (JR-15)
R = 3-nitro (JR-16)
R = 4-quinolina (JR-18)
R = 3-indol (JR-19)
R = 1-piperidil (JR-20)
R = 2-piridil (JR-21)



Fonte: Elaborado pelo autor

Gráfico 1: Confôrmeros anti (A) e syn-periplanar (B), respectivamente, do composto JR09



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 1. Prováveis isômeros conformacionais do composto JR09

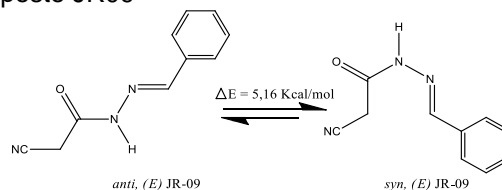
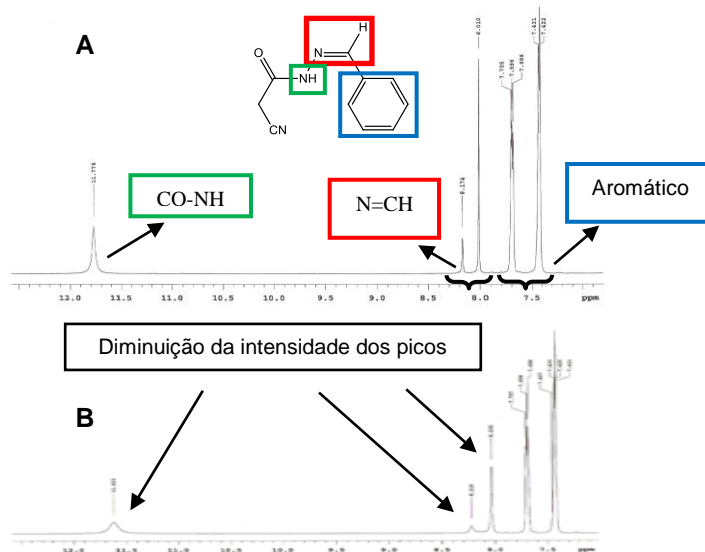


Figura 2. Espectro de RMN de ¹H do composto JR09 à temperatura de 26 °C (A) e 60 °C (B).



Conclusões

Foram obtidos 11 derivados *N*-acilidrazônicos. Através dos cálculos de energia mínima e dinâmica molecular, com o auxílio do RMN de ¹H com variação de temperatura, pode-se identificar a conformação mais estável bem como a possível formação de conformeros.

Agradecimentos

CAPES; CNPq; UEPB

¹ CLAYDEN, Jonathan et al. Organic Chemistry. IE - Oxford, 2000.

² OLIVEIRA, A. C. Princípios básicos da modelagem molecular e sua aplicação no desenvolvimento de novos fármacos. In: II Jornada de Inverno de Química. 2010.



Uma avaliação da sinergia entre sonoquímica e solventes eutéticos profundos (DES) sobre o perfil de aquecimento da água

Isadora Maria Gouveia Andrade (IC)^{1*}, Rachel Azevedo Maia (IC)¹, Edvaldo de Souza Silva (IC)¹, Whesley Silva de Moraes (PG)², Silvanda de Melo Silva (PQ)^{1,2}, Dayse N. Moreira (PQ)¹

*isagoveia18a@gmail.com

¹Departamento de Química e Física, Centro de Ciências Agrárias, Universidade Federal da Paraíba, Campus II, CEP 58397-000, Areia, PB, Brasil.

²Programa de Pós Graduação em Ciência e Tecnologia de Alimentos, Centro de Tecnologia, Universidade Federal da Paraíba, Campus I, CEP 58051-900, João Pessoa, PB, Brasil.

Palavras Chave: *ultrassom, DES, padronização.*

Introdução

O desenvolvimento de metodologias mais eficientes e benignas ambientalmente é uma das principais metas dentro da área de Síntese Orgânica.¹ Neste contexto, o ultrassom (US), considerado uma tecnologia limpa, possibilita menor gasto de energia de substâncias químicas e, conseqüentemente, menor geração de efluentes, além de proporcionar tempo de processamento menor e redução da necessidade de aplicação de calor em vários processos.² No entanto, ainda existe necessidade de estudos metodológicos que avaliem os efeitos dos diversos parâmetros reacionais sobre o uso deste equipamento.³ Assim, os objetivos deste trabalho estão relacionados à avaliação do perfil de aquecimento da água em ultrassom de *probe* para posterior aplicação no desenvolvimento de biofilmes.

Resultados e Discussão

O perfil de aquecimento da água em ultrassom foi determinado em um equipamento Hielsher UP200Ht (probe de 1,25 mm). As medidas foram realizadas em tubos que continham um volume de 10 mL de água destilada, durante 15 min, com e sem a adição de 1 mmol do solvente eutético profundo (DES). A síntese do DES foi realizada a partir de cloreto de colina e ureia em uma razão molar de 1:2, a 80°C durante 1 hora, sob agitação constante.

A **Figura 1** apresenta gráfico de temperaturas (°C) versus tempo (minutos) obtidos após o solvente ser irradiado com ultrassom. Os dados demonstram maior temperatura atingida quando o aditivo DES foi adicionado, especialmente quando a amplitude de 90% foi utilizada. Outro importante parâmetro a ser determinado é a Potência Dissipada, a qual foi calculada através do método calorimétrico, que envolve a capacidade calorífica, massa e variação de temperatura: $P (W) = CpM \, dT / dt$.

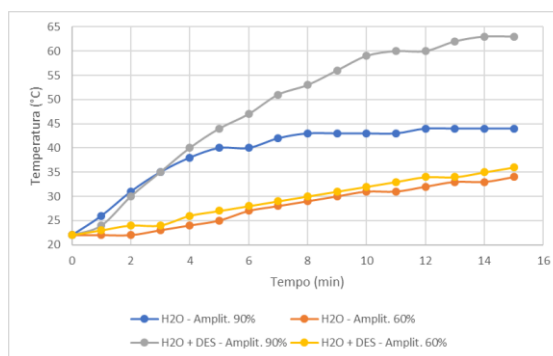


Figura 1. Perfil de aquecimento da água pura e com DES durante 15 min de irradiação com US.

A partir das rampas de aquecimento foram obtidas as equações da reta, dT/dt e o R^2 . Os valores encontrados demonstram que o coeficiente de correlação está relacionado a amplitude utilizada, bem como a presença do aditivo DES. O maior R^2 (0,9897) foi observado na amplitude de 90%, na presença do DES. Nesta condição também foi encontrada a maior potência dissipada (292,35 W), sendo esta 21% maior de que sem o aditivo.

Conclusões

Através das medidas realizadas pode-se concluir que a combinação entre água/DES constitui uma condição promissora para a utilização em US.

Agradecimentos

Ao CNPQ pelo apoio financeiro.

¹(a) Poliakoff, M. and Licence, P. *Nature* **2007**, *450*, 810; (b) Bruckmann, A.; Krebs, A.; Bolm, C. *Green Chem.* **2008**, *10*, 1131.

²Bernardo, C. O.; Ascheri, J.L.R.; Carvalho, C. W. P. *Ciência Rural*. **2016**, *46*, 739-746.

³Frizzo, C.P.; Bacim, C.; Moreira, D.N.; Rodrigues, L.V.; Zimmer, G.C.; Bonacorso, H.G.; Zanatta, N.; Martins, M.A.P. *Ultrason. Sonochem.* **2016**, *32*, 432.



Busca Conformacional Usando o QMDFP para Encontrar Conforméromos de Complexo de Ln(III) com Ligante Flexíveis em Solução.

Luiz Eduardo Gomes da Cruz¹ (IC)*, Gerd B Rocha¹ (PQ), Sidney Ramos de Santana² (PQ).

¹Universidade Federal da Paraíba – Campus I; ²Universidade Federal da Paraíba – Campus II

luiz_eduardo_gc@hotmail.com

Palavras Chave: QMDFP, Complexo de Ln(III), Dinâmica Molecular.

Introdução

É conhecido que propriedades espectroscópicas e termoquímicas de moléculas são dependentes da população dos seus isômeros em solução. Deste modo, diferentes estratégias de busca conformacional tem sido aplicada para encontrar os conforméromos. Tais estratégias dependem de quão flexível o ligante é, seu tamanho e tipo (orgânico, inorgânico ou biomolecular). Fazer busca conformacional para complexos inorgânicos contém grandes e flexíveis ligantes, que precisam de um bom campo de força [1]. O principal obstáculo em usar um campo de força tradicional para modelar moléculas inorgânicas é a falta de bons parâmetros para descrever adequadamente sua geometria e fatores energéticos, como os modos de coordenação dos ligantes, mudanças na barreira conformacional, entre outras [1]. O QMDFP (*quantum Mechanically Derived Force Field*) é uma nova tentativa que apresenta uma derivação automática dos parâmetros do campo de força através de cálculos de mecânica quântica [2]. Esta metodologia usa a geometria de equilíbrio, cargas atômicas, Hessiana e matriz densidade para derivação dos parâmetros do campo de força a partir de um ajuste multidimensional. Uma vantagem do uso do QMDFP é que os parâmetros gerados são exclusivos para o sistema em uso. Neste trabalho foi feito um estudo conformacional do complexo macrocíclico [Eu(DOTA) H₂O], onde o DOTA é ligante flexível ácido 1,4,7,10-tetraazaciclodecano-1,4,7,10-tetracético, sendo usado o QMDFP para encontrar os conforméromos em solução A1, IA1, IA2 e A2 [3].

Resultados e Discussão

Conforméromos em porcentagem para os quais, 100% = 29592 estruturas, sendo que 74,68% foram de conforméromos não definidos. É importante elucidar que tais resultados tem um enfoque qualitativo, pois os resultados quantitativos podem variar conforme o tempo de dinâmica em que se pretende simular o sistema.

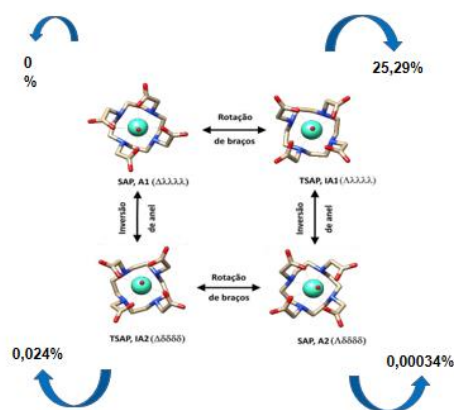


Figura 1. Conforméromos do [Eu(DOTA) H₂O].

Conclusões

O próprio autor do QMDFP, afirma a existência da dificuldade de fazer busca conformacional com apenas otimização de geometria e dinâmica. De qualquer modo, mostramos que é possível fazer busca conformacional usando otimização de geometria e dinâmica molecular para encontrar os isômeros com o QMDFP. Através deste estudo, desenvolvemos uma simples estratégia de performance de busca conformacional para encontrar isômeros deste tipo de composto.

Agradecimentos

Somos gratos por todo aporte financeiro proporcionado pelo CNPq, Capes e UFPB. E por todo apoio científico do LQCC.

¹P. Comba, T.W. Hamblry, B. Martin, Molecular Modeling and Inorganic Compounds, (2009) Wiley-VCH, 3a. ed., New York.

²Grimme, S., Antony, J. Erlich, S. e Krieg, S., J. Chem. Phys., 2010, 132, 154104.

³OLIVEIRA, Maria Weruska Pereira de et. Al. Estudos Conformacionais em Compostos Contendo Íons Lantanídeos. 2008.



Moléculas potencialmente cancerígenas: Estudo DFT da estabilidade de algumas *N*-Nitrosaminas cíclicas

Iza Fernanda Barbosa da Silva* (IC), Lorrane Lima (IC), Edgley Alves Batista (IC), Jacqueline Morais da Costa (PG), Raiton Barbosa de Andrade (PQ)

Barbosafernandaa@outlook.com

Departamento de Química, CCEN, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, PB, Brazil, 58.059-900.

Palavras Chave: *N*-Nitrosaminas, DFT, Estabilidade.

Introdução

N-Nitrosaminas são compostos orgânicos alifáticos ou aromáticos que possuem um grupo funcional nitroso NO¹. Esses compostos quando expostos a radiação ultravioleta, podem formar radicais amino e óxido nitroso (ver Figura 1).

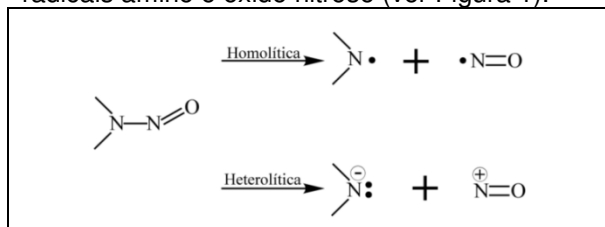


Figura 1: quebra da ligação N-N em *N*-nitrosaminas.

A Agência Internacional para a Pesquisa sobre o Câncer, agência vinculada a OMC (Organização Mundial da Saúde), incluiu as *N*-Nitrosaminas no Grupo 1 de risco de desenvolvimento de câncer². O objetivo deste trabalho envolve a investigação teórica da estabilidade de algumas *N*-nitrosaminas cíclicas no estado fundamental utilizando métodos de estrutura eletrônica baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT, do inglês *Density Functional Theory*).

Resultados e Discussão

A parte inicial desse trabalho envolveu a otimização das estruturas correspondentes a *N*-nitrosamina monocíclica e as bicíclicas.

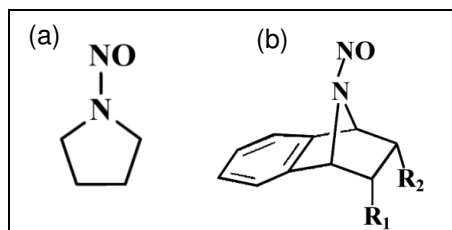


Figura 2: Representação das *N*-nitrosaminas estudadas, monocíclica (a) e bicíclica (b).

Para investigação teórica da estabilidade de algumas *N*-nitrosaminas o trabalho contou com a montagem destas estruturas no *software* GaussView-5.0. Nessa etapa, foi testada a adição dos substituintes (H e CH₃) nas posições R₁ e R₂

indicados na Figura 2. Todos os cálculos de frequência indicam que as geometrias obtidas representam estruturas de mínimo.

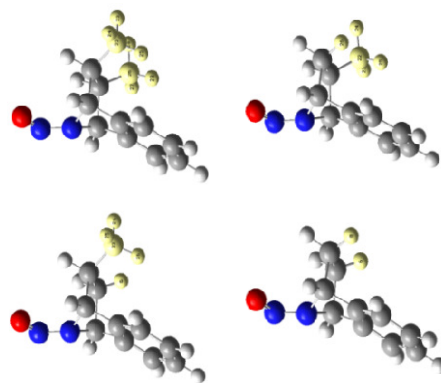


Figura 3: Estruturas estudadas.

A Figura 3 representa as estruturas estudadas. Os resultados analisados indicam que as distâncias de ligação NN estão aumentando quando comparamos com o sistema monocíclico representado na Figura 2 (a), indicando assim um enfraquecimento dessa ligação especificamente. Para o comprimento de ligação NO, ocorreu o inverso, ou seja, todas as estruturas bicíclicas resultaram em distâncias NO maiores que as distâncias NO na *N*-nitrosaminas monocíclica.

Conclusões

Neste trabalho investigamos o efeito de alguns substituintes (H e CH₃). A partir dos cálculos executados observamos que os substituintes provocaram uma desestabilização da distância de ligação NN. Outros estudos se fazem necessário.

Agradecimentos



¹ JURADO, S. B.; GALLEGU, B.E. M. *J. Chrom. A*, p.1200-1205, 2009.

² BOUVARD, V. *et al.*, *The Lancet Oncology*, 16, 1599-1600. 2015.



PERCEPÇÃO DOS DISCENTES SOBRE A TUTORIA DA DISCIPLINA INTRODUÇÃO ÀS TRANSFORMAÇÕES QUÍMICAS

Sabrina Cruz de Souza^{1*} (IC), Maria Betania Hermenegildo dos Santos¹ (PQ)
*sabrina00.cruz@hotmail.com

¹Departamento de Química e Física, Centro de Ciências Agrárias, Universidade Federal da Paraíba, Campus II, CEP 58397-000, Areia, PB, Brasil.

Palavras-Chave: Tutoria, Avaliação, Aprendizagem.

Introdução

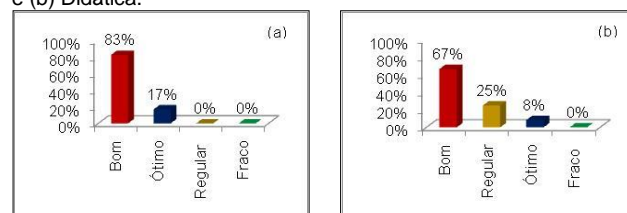
A palavra “tutoria” vem do latim *tutari* e significa pôr em segurança, o que justifica seu uso no meio acadêmico como estratégia de ensino e de aprendizagem em regime de colaboração por meio da qual os estudantes que desejam e/ou necessitam de assistência adicional em uma disciplina (tutorandos), são auxiliados por tutores^[1,2]. Assim, a tutoria pode ser considerada como uma atividade que se caracteriza na conexão entre tutores e tutorandos, com o propósito de debater temáticas e dispor conhecimentos teóricos e práticos. Além disto, tem como finalidade oferecer suporte aos alunos e elaborar recursos pedagógicos, que se articula com o conceito de que todos são capazes de aprender. A tutoria, é um projeto baseado na participação de discentes e docentes, no qual o tutor exerce interação e compartilha da aprendizagem com o tutorando, sobre a supervisão do docente coordenador a quem compete à instauração de atividades colaborativas e conjunta. Conseqüentemente, essa estratégia de ensino torna-se eminente ao ambiente acadêmico^[1,2,3]. Baseado no exposto, o objetivo desta pesquisa foi avaliar a percepção dos discentes sobre a tutoria da parte experimental da disciplina Introdução às Transformações Químicas. A pesquisa foi realizada no Centro de Ciências Agrárias da Universidade Federal da Paraíba, Areia-PB e o público alvo foram 12 alunos que cursaram a disciplina supracitada. Como instrumento de coleta de dados utilizou-se um questionário contendo questões objetivas.

Resultados e Discussão

Na Figura 1, está exposto o percentual de respostas quando foi solicitado aos discentes para avaliar a tutoria quanto: (a) Desempenho durante disciplina e (b) Didática. Ao analisar a Figura 1 (a), observa-se que os discentes classificaram o desempenho da tutoria como ótimo ou bom e 75% apresentaram a mesma classificação para sua didática, conforme exposto na Figura 1 (b). Na Figura 2, visualiza-se o percentual de respostas quando foi solicitado aos discentes para avaliar a

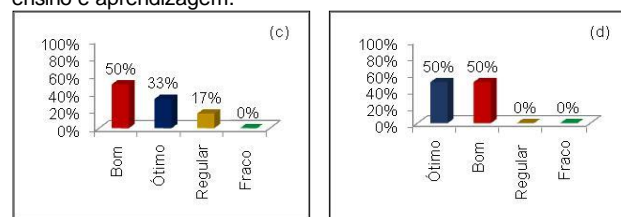
tutoria quanto: (c) Nível de conhecimento relacionado ao conteúdo da disciplina e (d) Auxílio no processo de ensino e aprendizagem.

Figura 1. Percentual de respostas quando foi solicitado aos discentes para avaliar a tutoria: (a) Desempenho durante disciplina e (b) Didática.



Nota-se na Figura 2 (c), que 83% dos discentes avaliaram o nível de conhecimento da tutoria relacionado ao conteúdo da disciplina como ótimo ou bom e todos consideraram que o auxílio fornecido por ela no processo de ensino e aprendizagem durante as aulas práticas foi ótimo ou bom de acordo com a Figura 2 (d).

Figura 2. Percentual de respostas quando foi solicitado aos discentes para avaliar a tutoria quanto: (c) Nível de conhecimento relacionado ao conteúdo da disciplina e (d) Auxílio no processo de ensino e aprendizagem.



Quando foi solicitado aos discentes para avaliar a assiduidade (comparecimento e pontualidade) e a interação da tutoria com a turma 96% classificaram como ótima ou boa.

Conclusões

Baseado nos resultados obtidos, pode-se concluir que a tutoria da parte experimental da disciplina Introdução às Transformações Químicas atingiu os objetivos propostos no projeto, uma vez, contribuiu no processo de ensino-aprendizagem dos tutorandos.

Referências

- [1]FRISON, L. M. B. *Rev. Port. de Educação*. 2012. 25, 217.
- [2]SÁ, A. N. M. *Edital PRG N° 03/2017*. 2017.
- [3]VICENZI, C. B. et al. *Rev. Ciênc. Ext.* v.12, n.3, p.88-94, 2016.



AVALIAÇÃO DO SOFTWARE DE SIMULAÇÕES PhET PELOS ALUNOS DO 1º ANO DO ENSINO MÉDIO

Paulo Renan Rodrigues dos Santos^{1*} (IC), Marcílio Veras Cardoso¹ (FM), Maria Betania Hermenegildo dos Santos¹ (PQ). *renan6333@gmail.com

¹Departamento de Química e Física (DQF), Centro de Ciências Agrárias, Universidade Federal da Paraíba, Campus II, CEP 58397-000, Areia, PB, Brasil.

Palavras-Chave: Ensino da Química, Recurso-didático, Simulador

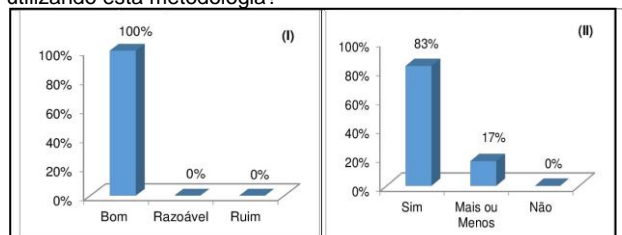
Introdução

É evidente a necessidade de mudanças metodológicas no ensino de Química, uma vez que, os alunos apresentam dificuldades de aprendizagem e os professores em manter estes interessados pela disciplina. Ante este fato, os professores devem utilizar metodologias diversificadas que sejam capazes de dinamizar as aulas tornando-as mais interessantes para os alunos^{1,2,3}. Dentre essas metodologias vem se destacando os softwares de simulação virtual, em particular o PhET, porque permite ao aluno estudar e entender diversos fenômenos naturais sem estar presente em um laboratório⁴. Dessa forma, o objetivo desta pesquisa foi avaliar a percepção dos alunos sobre a utilização do software de simulações PhET como recurso didático para o ensino dos estados físicos da matéria. A pesquisa foi desenvolvida em uma escola estadual na cidade de Areia-PB, o público alvo foram 18 alunos do 1º ano do ensino médio. O instrumento de coleta de dados usado foi o questionário composto de questões objetivas e subjetivas.

Resultados e Discussão

Ao analisar a Figura 1 (I) verifica-se que 100% dos alunos indagados classificaram a metodologia utilizada como “boa” e justificam: “Porque aprendemos diferenciar como as moléculas estão em cada estado”.

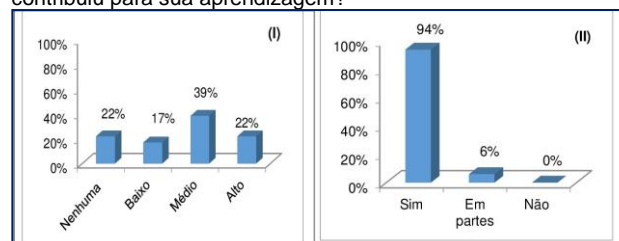
Figura 1. Percentual de resposta dos discentes quando questionados: (I) como você classifica a metodologia aplicada na aula? e (II) você conseguiu compreender os conceitos químicos utilizando esta metodologia?



Quando questionados se conseguiram compreender os conceitos químicos com utilização do simulador PhET, 83% afirmaram que “sim”.

(Figura 1 (II)) e relataram: “Porque eles usaram um simulador, que foi mais fácil de compreender.” Quando interrogados sobre o grau de dificuldade enfrentada ao utilizar o simulador PhET, 22% dos alunos responderam “nenhuma”; 56% classificaram o grau como “baixo” ou “médio” e outros 22% responderam “alto”.

Figura 2. Percentual de resposta dos discentes quando indagados: (I) como você classificaria o seu grau de dificuldade do programa computacional Phet e (II) a metodologia utilizada contribuiu para sua aprendizagem?



Quando foram questionados se a metodologia utilizada contribuiu para sua aprendizagem 94% dos discentes indagados relevaram que “sim” Figura 2 (II) e acrescentam: “Pois coisas que eu não entendia, ficou melhor de entender”.

Conclusões

Baseado nos resultados obtidos pode-se concluir que a abordagem do tema por meio do software de simulações PhET foi bem aceita pelos alunos, além disso contribuiu na compreensão e na aprendizagem do conteúdo.

Agradecimentos

À CAPES/PIBID, a UFPA/CCA/DQF e a Escola participante

¹ KAFER, G. A. *Dissertação (Mestrado em Ensino de Ciências Exatas)*. 2015.

² Lima, M. A.; Gonçalves, M. A.; Varelo, M. F. F.; Nascimento, A. Q. *53º Congresso Brasileiro de Química*. 2013.

³ OLIVEIRA NETTO, A. *Petrópolis: vozes*, 2005.

⁴ MENDES, A. P. SANTANA, G. P.; PESSOA JÚNIOR, E. S. F.. *Revista Amazônica de Ensino de Ciências*. 2015, 8, 52.



Avaliação de um jogo lúdico de cartas por licenciandos do curso de química

Thyago Marques Monteiro* (IC); Claudio Gabriel de Lima-Junior (PQ)

Departamento de Química, Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Universidade Federal da Paraíba, Cidade Universitária, s/n - Castelo Branco, 58051-900, João Pessoa-PB.

¹ thyago_mm@hotmail.com, ² claudio@quimica.ufpb.br

Palavras Chave: Ensino de química, Jogo lúdico, Tabela periódica.

Introdução

A utilização de jogos lúdicos tem se apresentado como uma ferramenta auxiliar no processo de ensino-aprendizagem de Química.¹ Com a aplicação de jogos lúdicos, ocorre o desenvolvimento de habilidades que envolvem o indivíduo em todos os aspectos: cognitivos, emocionais e relacionais, fazendo com que se aprenda de forma mais natural e com menos pressão². Esse trabalho traz resultados preliminares da avaliação de um jogo de cartas para o ensino de química por licenciandos do curso de Química da UFPB.

Resultados e Discussão

O jogo foi previamente elaborado com base no jogo de pôquer e construído usando materiais de baixo custo. O jogo possui 112 cartas, representando os elementos químicos da tabela periódica e suas respectivas propriedades e fichas de valores (fig. 1), representadas de 1 á 100 mol(s), utilizadas como apostas no jogo.

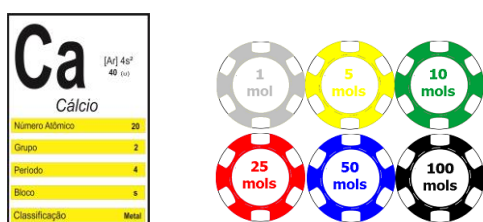


Figura 1. Cartas e fichas do jogo.

As regras foram elaboradas baseadas no pôquer clássico levando em consideração a probabilidade estatística de ocorrência de determinadas combinações possíveis para pontuação, sequencias estas relacionadas a propriedades periódicas, atomicidade, período e família dos elementos da tabela periódica. A proposta foi apresentada a 30 alunos matriculados ativamente no curso de licenciatura em química da UFPB (período 2016.1).

A proposta do jogo foi explicada aos licenciandos e em seguida os mesmos fizeram uso do jogo (Figura 2).



Figura 2. Licenciandos jogando o pôquer químico

Observou-se inicialmente certa dificuldade com relação às regras impostas pelo jogo. Após alguns esclarecimentos adicionais, os alunos se mostraram mais seguros na execução do jogo. Após a aplicação da proposta, todos responderam a um questionário de avaliação, onde para a maioria dos participantes (79%) não foi encontrada dificuldades para o uso do jogo, avaliando-se as regras como claras. Os licenciandos avaliaram como sendo um método eficaz para o ensino a aplicação do jogo, onde para 82%, o jogo pode ser eficaz para ser utilizado durante o ensino de tabela periódica, podendo vir a contribuir de forma significativa para os estudantes a conhecerem melhor os elementos químicos presentes na tabela periódica, além das propriedades periódicas.

Conclusões

O jogo lúdico de pôquer dos elementos químicos da tabela periódica foi avaliado de forma positiva pelos licenciandos em Química. Aplicações do jogo em turmas do ensino médio estão em andamento.

Agradecimentos

UFPB, Departamento de Química

¹ Soares, M. H. F. *Jogos e atividades lúdicas para o ensino de Química*. Goiânia: Editora Kelps, 2013.

² VYGOTSKY, L. S. O papel do brinquedo no desenvolvimento. In: A formação social da mente. 6. ed., São Paulo: Martins Fontes, 1991.



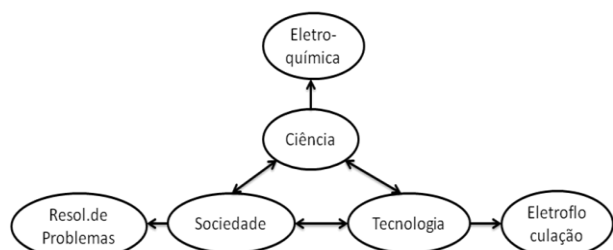
ELETROFLOCULAÇÃO COMO UMA DAS ETAPAS NO TRATAMENTO DA ÁGUA, ABORDANDO A IMPORTÂNCIA NO ENSINO ELETROQUÍMICO

Kethully Albuquerque F. de Lima*¹ (IC), Analice de Almeida Lima¹ (PQ)

¹Universidade Federal Rural de Pernambuco, Departamento de Química – Campus Dois Irmãos, Recife - PE, CEP: 52171-900. E-mail: thulla_12@hotmail.com

Palavras Chave: Eletroquímica, Eletrofloculação, Tratamento de Água, CTS, Resolução de Problemas.

Introdução



Esse trabalho teve por objetivo utilizar a eletrofloculação como um experimento didático visando melhorar a compreensão dos alunos na abordagem do conteúdo eletroquímico. Para tal foi realizada uma oficina experimental durante o período da disciplina Estágio Supervisionado 2 na UFRPE, com o tema “Tratamento da Água, com a Eletrofloculação como uma das Etapas do Processo”, na turma do 2º Ano A do Ensino Médio da Escola Conselheiro Samuel Mac Dowell, situada no bairro de Jardim Primavera – Camaragibe/PE.

Resultados e Discussão

Inicialmente realizou-se um experimento sobre eletrofloculação com um total de 15 alunos. Em seguida, foi pedido que os alunos respondessem as questões relacionadas ao tema. Na análise das respostas observou-se que todos os alunos responderam as questões propostas de maneira correta.

Quanto à primeira pergunta que trazia como questionamento: “1. Quais reações ocorrem neste experimento?”, obtiveram-se dois tipos de respostas, conforme descrito na tabela 1.

Tabela 1. Respostas dos alunos para a pergunta 1

Pergunta 1	Resposta 1: “Acontece a liberação do hidrogênio na formação de bolhas e a formação do hidróxido de ferro”
	Resposta 2: “Formação do hidróxido de ferro: $3OH + Fe^{3+} \rightarrow Fe(OH)_3$ ”

Fonte: As autoras

Na resposta 1 observou-se que apenas houve a descrição do que foi visualizado no experimento. Quanto a resposta 2 percebeu-se que houve o uso representacional das reações ocorridas.

A questão-problema (QP) trazia o seguinte enunciado: “Em que situação você utilizaria a eletrofloculação no tratamento da água? Como você adaptaria este sistema. Você vê vantagens em utilizar este método?”. As respostas fornecidas pelos alunos puderam ser divididas em dois tipos, conforme Tabela 2.

Tabela 2. Respostas dos alunos para QP

QP	Resposta 1: “Em estações de tratamento de água com pequena quantidade de água e pouco espaço, pois este método requer espaços menores e menos água para os processos de lavagem. Embora seja um método mais caro é muito melhor quando avaliamos do ponto de vista ambiental, já que gera menos resíduo e consome menos água”
	Resposta 2: “Iria substituir o método tradicional onde se utiliza o agente químico para a formação dos floculos. A vantagem deste método é que não utilizaria o agente químico fazendo com que gerasse menos resíduos no ambiente”

Fonte: As autoras

Ambas as respostas satisfazem o objetivo de aplicação da questão-problema.

Conclusões

Os alunos demonstraram bastante interesse na realização do experimento e através dos questionamentos realizados observou-se que os mesmos conseguiram realizar a relação entre a teoria e prática.

Agradecimentos

Ao professor e aos alunos da Escola Conselheiro Samuel Mac Dowell.

MORIN, Edgar. 1921. *Ciência com consciência*; tradução de Maria D. Alexandre e Maria Alice Sampaio Dória. – Ed. revista e modificada pelo autor – 8ª Ed. – Rio de Janeiro: Bertrand. Brasil, 2005. 350p. Disponível em: <https://www.passeidireto.com/arquivo/18352956/ciencia-com-consciencia---edgar-morin>. Acessado em 03/07/2017.

JUNIOR, M. S. L. P.; NETO, J. E. S. *Situações-problema como Estratégia Didática para o Ensino dos Modelos Atômicos*. R. Bras. de Ensino de C&T. vol 8, núm. 2, mai-ago. 2015. Disponível em: <https://periodicos.utfpr.edu.br/rbect/article/download/2725/2185>. Acessado em 03/07/2017.



Planejamento, aplicação e avaliação de um modelo híbrido de ensino em química: relato de experiência no ensino médio.

Nayara de Lima Oliveira^{1*} (IC), Claudio Gabriel Lima-Junior¹ (PQ).

quimicanayara7@gmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Federal da Paraíba, Campus I, João Pessoa - PB.

Palavras Chave: ensino híbrido, química, ensino médio.

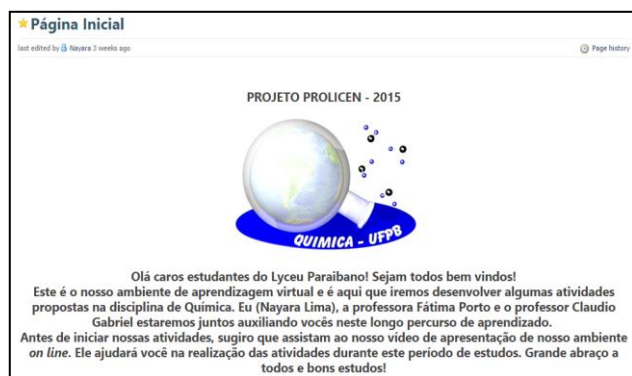
Introdução

A combinação de instrução em sala de aula (face a face) com instrução *on line* como modelo híbrido de aprendizado vem se apresentando como uma crescente tendência nas universidades¹. No ensino de Química, observa-se que poucos são os relatos na literatura que envolve investigações no ensino médio². Apresentamos resultados da aplicação de um modelo híbrido aplicado ao ensino de Química para estudantes do 3º ano do ensino médio da Escola Estadual Lyceu Paraíbano, matriculados no turno da tarde.

Resultados e Discussão

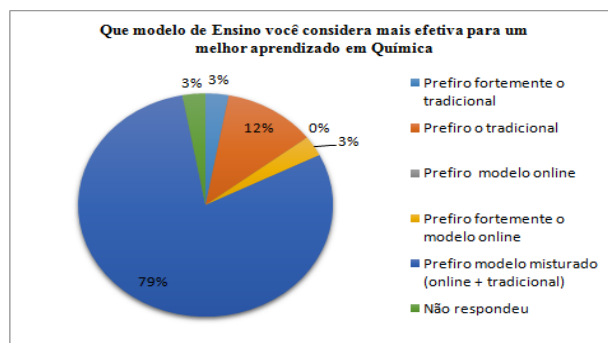
A investigação utilizou a ferramenta *Pbworks* como ambiente virtual de aprendizagem e as atividades desenvolvidas foram planejadas pela professora juntamente com a tutora, assim como a construção dos materiais de apoio utilizado pelos estudantes, tais como mídias do tipo impressas, áudio e vídeo. Alguns materiais foram construídos a partir de temas sociais (aquecimento global, alcoolismo e tabagismo), sugeridos pela professora da disciplina. Após aplicação do questionário 56 estudantes aos quais todos foram cadastrados previamente no AVA (Ambiente Virtual de Aprendizagem) *Pbworks*.

Figura 1. AVA *Pbworks* criado para aplicação do modelo híbrido de ensino



Do ponto de vista quantitativo, a professora da disciplina observou que não ocorreu diferenças consideráveis em relação aos rendimentos escolares dos estudantes investigados na metodologia híbrida e quando comparado com os que não participaram da proposta. No entanto, a ampliação do espaço escolar favoreceu a um aumento da interação entre os estudantes, tornando-os mais participativos em sala de aula.

Figura 2. Modelo de ensino preferencial dos estudantes avaliados



Conclusões

A maioria dos estudantes aprovou de forma positiva, tanto o modelo misturado quanto os materiais produzidos, além de considerar o ambiente *on line* utilizado de fácil usabilidade. Alguns fatores limitadores da aplicação da metodologia misturada foram à baixa qualidade em algumas contribuições nos fóruns de debate e a não gerencia de tempo, fazendo com que alguns prazos na realização dos exercícios fossem dilatados.

Agradecimentos

Universidade Federal da Paraíba, Departamento de Química, Pró-Reitoria de graduação.

¹ Christiansen, M. A. *Journal of Chemical Education*. 2014, 91, 1845.

² Helms, S. A. *Interactive Learning Environments*. 2014, 22, 804.



QUIMIFIGHT: uma proposta de jogo para o ensino de nomenclatura de compostos orgânicos na perspectiva de licenciandos em química

Reobe Felipe da Silva^{1*} (IC), Tchiara M. Alves Tenório¹ (IC), Daysnan Nicolly A. dos Santos¹ (IC), José Roberto de S. S. Filho¹ (IC), Cristiano de A. C. Marcelino Junior¹ (PQ).

¹ Departamento de Química da Universidade Federal Rural de Pernambuco (UFRPE). Rua Dom Manoel de Medeiros, s/n, Dois Irmãos - CEP: 52171-900 - Recife/PE. *reobefelipe@outlook.com.

Palavras Chave: Jogo educativo, batalha naval, orgânica.

Introdução

Jogos educativos podem ser definidos como atividades significativas que são estabelecidas sobre regras desenvolvidas pelo professor ou em conjunto com os alunos, a fim de obter resultados cognitivos, emocionais e educacionais por parte dos estudantes¹. Soares² (2008) mostra que há tempos estudiosos têm ocupado seu tempo e estudo analisando qual o real objetivo do jogo educativo, qual a melhor maneira de utilizá-lo em sala de aula e como essa utilização pode ser numa totalidade satisfatória. De acordo com Cunha³ (2012) são jogos educativos aqueles que permitem o desenvolvimento de habilidades cognitivas que são redundantes no processo de ensino-aprendizagem. Algumas dessas habilidades são: resolução de problemas, criatividade, raciocínio lógico, entre outras.

Diante desse aspecto lúdico-educacional, surgiu o jogo *QUIMIFIGHT* como uma proposta de atividade auxiliadora para o ensino de nomenclatura de compostos orgânicos. Sendo uma adaptação do conhecido jogo de tabuleiro “batalha-naval”, ele se apresenta como uma ferramenta altamente eficaz tanto no momento de introdução do conteúdo, quanto na revisão e solidificação dos conceitos vistos. O mesmo, foi avaliado por alunos do curso de licenciatura plena em química da UFRPE, observando se o mesmo atinge os objetivos propostos para jogos educacionais.

Resultados e Discussão

A avaliação do *QUIMIFIGHT* pelos licenciandos em química se deu como uma ferramenta de análise e validação do jogo didático. Nela os alunos julgaram se o material didático apresentado satisfaz aos objetivos propostos por Cunha³ (2012) para jogos educativos.

Os resultados foram recolhidos através de gravação de áudio, onde foram feitos alguns questionamentos aos alunos acerca do jogo e de suas perspectivas sobre o mesmo. Os principais aspectos observados

acerca do jogo presentes nas falas dos licenciandos pesquisados estão elencados na **Tabela 01** abaixo:

Tabela 01. Análises do *QUIMIFIGHT* apresentadas pelos licenciandos em química da UFRPE.

Aspectos positivos	Aspectos Negativos
[1] as cartilhas “informação” (cartilhas que apresentam informações sobre as moléculas “descobertas” pelos alunos na batalha naval e sua aplicabilidade) podem proporcionar discussões e revisão de conceitos; [2] o jogo pode ser visto como uma ferramenta para motivar o aluno à busca por outros conhecimentos de química para além do visto na aula; [3] versatilidade do jogo, podendo ser adaptado para diversos outros conteúdos de química; [4] o jogo traz uma interdisciplinaridade entre conteúdos de química; [5] o jogo pode contribuir para a formação social dos estudantes a partir de interações professor-aluno e aluno-aluno; e, [6] o jogo ajuda na formulação de sistemas de representação e organização de conceitos.	[1] Desinteresse dos alunos acerca da atividade, principalmente se a mesma for proposta em uma turma com muitos alunos; e, [2] possível participação de apenas alguns alunos nas respostas aos questionamentos apresentados no jogo.

Conclusões

Assim como todo jogo educativo, o *QUIMIFIGHT* apresenta aspectos positivos e negativos, sob a ótica dos licenciandos em química pesquisados. Porém, quando comparado à literatura, este instrumento didático conseguiu atingir todos os objetivos propostos. Tornando-se uma ferramenta bastante indicada para auxiliar o ensino de nomenclatura de compostos orgânicos ou outros.

Agradecimentos

À Universidade Federal Rural de Pernambuco; ao curso de Licenciatura Plena em Química da instituição; e, aos licenciandos que participaram da pesquisa.

¹ NAJDIA, S.; EL SHEIKHB, R. Educational Games: Do They Make a Difference? *PROCEDIA - Social and Behavioral Sciences*. Volume 47, 2012, p. 48–51.

² SOARES, M. H. F. B.. Jogos e Atividades Lúdicas no Ensino de Química: Teoria, Métodos e Aplicações. In: *XIV Encontro Nacional de Ensino de Química*. Curitiba: UFPR, 2008.

³ CUNHA, M. B.. Jogos no Ensino de Química: Considerações Teóricas para sua Utilização em Sala de Aula. *Rev. Química Nova na Escola / Jogos no Ensino de Química*. Vol. 34, nº 2,– 2012, p. 92-98.



ELABORAÇÃO DE MATERIAL DIDÁTICO TEÓRICO-PRÁTICO PARA A DISCIPLINA DE QUÍMICA ORGÂNICA EXPERIMENTAL II

Wallis Cavalcante do Nascimento¹ (IC)*, Gabriela Fehn Fiss¹ (PQ).

¹Departamento de Química/CCEN/Universidade Federal da Paraíba. *wallyscavalcante89@gmail.com

Palavras Chave: material didático, química orgânica experimental, tabela de dados.

Introdução

Disciplinas experimentais anseiam um material didático tanto teórico quanto prático, que retome conteúdos teóricos fundamentais vistos anteriormente em disciplinas teóricas correspondentes, e apresente orientações práticas escritas, acrescidas das orientações orais dadas pelo professor durante as aulas. Neste sentido, este trabalho teve como objetivo apresentar um material didático teórico-prático elaborado para a disciplina de Química Orgânica Experimental II, do Departamento de Química, orientando alunos, professores e técnicos envolvidos, relacionando-o à estratégia e aos processos de aprendizagem organizacional.¹

Resultados e Discussão

Todas as aulas práticas tiveram como padrão a seguinte tabela:

Figura 1. Tabela-padrão das aulas práticas

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA – CAMPUS I CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Disciplina de Química Orgânica Experimental II (1105179) Turma: _____ Data: _____								
Aluno: _____								
Aula prática: _____								
Reação								
Composto	MM (g.mol ⁻¹)	n (mol)	m (g)	d (g.mL ⁻¹)	V (mL)	PF (°C)	PE (°C)	Eq.
Materiais		Equipamentos		Reagentes/Solventes				
Mecanismo								
Questionário								
(01)								
(02)								

Através desta tabela-padrão, além da organização funcional, estimulou-se o aluno a realizar os cálculos necessários para o desenvolvimento da reação, seguido do preenchimento dos dados obtidos por ele mesmo, sendo que os dados calculados são,

geralmente, dependentes da etapa (rendimento) anterior. Em ordem de uso, também foram apresentados os materiais e reagentes necessários, e indicadas as suas localizações nos locais apropriados (bancada, capela). Enquanto o tempo necessário de reação transcorria, o mecanismo reacional foi esboçado e discutido pelo professor no quadro-branco, para posterior preenchimento pelo próprio aluno na tabela-padrão. Ainda durante a realização da aula prática, foram propostos questionamentos indispensáveis para o entendimento da reação. Assim, a aula se manteve sempre ativa e dinâmica durante a realização das atividades.

Conclusões

O material didático desenvolvido durante o Programa de Monitoria na disciplina de Química Orgânica Experimental II, no Departamento de Química, foi de extrema utilidade para todos os envolvidos, alunos, professores e técnicos, pois preserva uma aula, além de organizada, ativa e dinâmica, mesclando entre teoria e prática. Elaborou-se uma apostila atualizada e de acordo com a realidade de disponibilidade e experiências vivenciadas no laboratório de química nos períodos 2015.2 a 2016.2.

Agradecimentos

UFPB, PRG e DQ.

¹Fleury, M. T. L. F.; Fleury, A.; *Rev. Adm. Contemp.* **2001**, 5, 183.

²DIAS, Ayres Guimarães; COSTA, Marco Antonio; GUIMARÃES, Pedro Ivo Canesso; **Guia Prático de Química de Química Orgânica**. 1ª edição. Rio de Janeiro: Editora Interciência, 2008.

³<http://coralx.ufsm.br/lab2228/docs/Tecnicas-aulas-experimentais-pdf.pdf>. Acesso em: 17/10/2016.



O USO DA EXPERIMENTAÇÃO COMO RECURSO AUXILIAR PARA O ENSINO DO CONTEÚDO DE SOLUÇÕES

Jefferson Bonifácio Silva^{1*} (IC), Thamyres Ribeiro da Silva¹ (IC), Maria Betania Hermenegildo dos Santos¹ (PG). *jeffersonbonny20@gmail.com

¹Departamento de Química e Física, Centro de Ciências Agrárias, Universidade Federal da Paraíba, Campus II, CEP 58397-000, Areia, PB, Brasil.

Palavras Chave: Química, Atividade experimental.

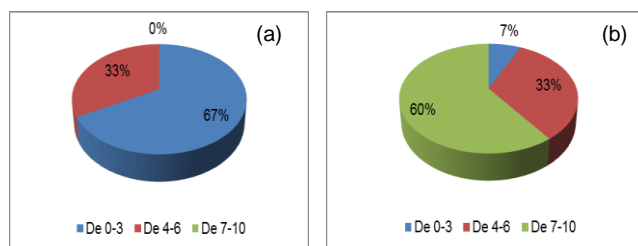
Introdução

Um dos grandes desafios no ensino de química é a utilização de diferentes estratégias que possibilitem uma mudança em relação ao ensino baseado no modelo transmissão-recepção. Sendo assim, é necessário buscar alternativas para que o aluno participe e torne-se ativo no processo de ensino-aprendizagem de química, tendo a experimentação se destacado^[1] por despertar o interesse dos alunos e proporcionar momentos de reflexão, podendo ser utilizada para diversos temas e finalidades, especialmente, em assuntos de aplicação no cotidiano, a exemplo das soluções^[2]. Ante o exposto o objetivo desta pesquisa foi utilizar a experimentação como recurso auxiliar para o ensino das soluções. O público alvo foram 27 alunos do 2º ano do ensino médio de uma escola estadual da cidade de Areia-PB. Como instrumento de coleta dos dados foi utilizado um pré-teste aplicado após as aulas expositivas e um pós – teste realizado após da atividade experimental. A estes foram atribuídas notas que variaram de 0 até 10.

Resultados e Discussão

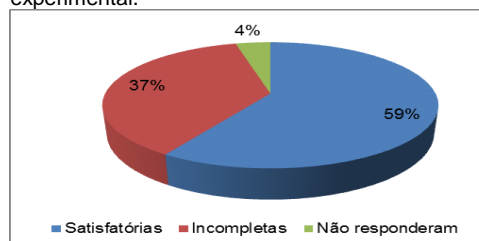
Ao analisar os resultados obtidos no pré-teste na Figura 1 (a), nota-se que os alunos tiveram um desempenho que variou de péssimo (notas entre 0 e 3) a regular (notas entre 4 e 6). Um dado que chama a atenção é que nenhum aluno atingiu a nota mínima que é 7. Ao comparar o resultado obtido no pré-teste com o do pós-teste que está demonstrado na Figura 1(b), ficou nítida a importância da utilização da experimentação como recurso auxiliar, uma vez que, a maioria dos alunos obtiveram notas entre 7 e 10 e apenas 7% dos alunos obteve um desempenho péssimo, cuja nota variou de 0 a 3.

Figura 1. Notas obtidas pelos alunos (a) pré-teste (b) pós- teste.



Quando solicitado aos alunos que descrevessem o que aconteceu na atividade experimental, a maioria explicou de forma clara e precisa, como revela a Figura 2.

Figura 2. Respostas dadas pelos alunos quando indagados sobre o que ocorreu durante a prática experimental.



Segundo a maior parte dos alunos as aulas com a utilização de experimentos são mais interessantes, já que fica mais fácil o entendimento e a ligação com o cotidiano.

Conclusões

Os resultados revelam que o uso de metodologias mais dinâmicas como a experimentação aguça o interesse dos alunos. Isso faz com que o processo de aprendizagem do conteúdo referente a soluções ocorra de forma mais concreta, uma vez que os alunos foram capazes de aplicá-lo em situações do cotidiano.

Agradecimentos

À CAPES/PIBID, a UFPB/CCA/DQF e a Escola participante.

^[1] MACHADO, A. H. *Aula de química: discurso e conhecimento*. 2.ed. Ijuí: Ed. Unijuí, 2004.

^[2] FREITAS, C. S.; RODRIGUES, M. F. *XIV Encontro Nacional de Ensino de Química*, 2008. Paraná: UFPR, 2008.



MAPEAMENTO DAS METODOLOGIAS UTILIZADAS PELOS DOCENTES DE QUÍMICA DAS ESCOLAS PÚBLICAS DA CIDADE DE AREIA – PB.

Maria Fidelis de Oliveira^{1*} (IC), Vitória Sobreira Aquino¹ (IC), Thamara do Carmo Oliveira Silva¹ (IC), Thaís do Carmo Oliveira Silva¹ (IC), Rafael Alexandre de Oliveira¹ (IC)*, Maria Betania Hermeengildo dos Santos (PQ). *mariaoliveiraa962@gmail.com

¹ Departamento de Química e Física, Centro de Ciências Agrárias, Universidade Federal da Paraíba, Campus II, CEP 58397-000, Areia, PB, Brasil.

Palavras Chave: Ensino, Transmissão-recepção.

Introdução

O estudo da química deve proporcionar ao aluno a possibilidade de uma visão crítica sobre seu ambiente concreto e, conseqüentemente, uma consciência que lhe oportunize transformar e intervir na sua realidade e no seu ambiente. Para que isto ocorra, é necessário que o aluno incorpore os conhecimentos adquiridos em sala de aula, os quais se tornarão parte da sua vida e serão transferidos para a prática. Assim, os professores devem utilizar metodologias diferenciadas que sejam motivadoras e atraentes que estimulem a construção do conhecimento, que ofereçam experiências de aprendizagem ricas em situações de participação nas quais os alunos possam opinar, assumir responsabilidades, resolver problemas e conflitos além de refletir sobre as conseqüências de seus atos^{1,2}. Tendo em vista essa problemática o presente trabalho teve como objetivo mapear as metodologias utilizadas por cinco docentes de química de duas escolas públicas da cidade de Areia - PB. Como instrumento de coleta dos dados utilizou-se um questionário composto por três questões.

Resultados e Discussão

Na Tabela 1 encontra-se o percentual de respostas dos docentes quando questionados: 1) Qual sua formação acadêmica? 2) Há quanto tempo você leciona a disciplina de Química?

Tabela 1. Percentual de respostas dos docentes quando questionados: 1) Qual sua formação acadêmica? 2) Há quanto tempo você leciona a disciplina de Química?

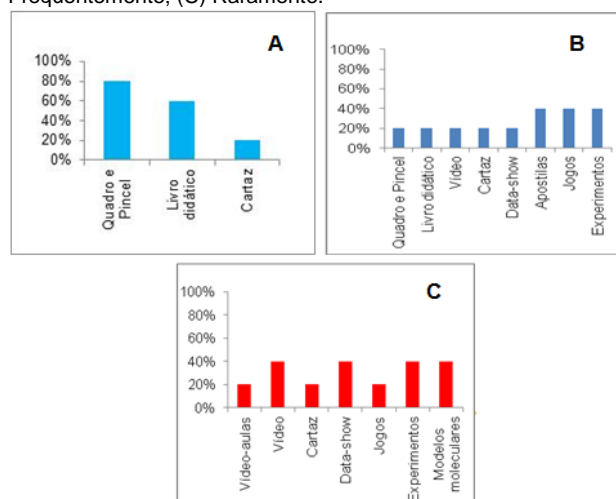
Área de Formação			
QUÍMICA	80%	FÍSICA	20%
Tempo de Atuação (anos)			
Menos de 1	60%	De 1 à 5	20%
De 5 a 10	20%	Mais de 10	0%

Fonte: Autores, 2017.

De acordo com a Tabela 1, cerca de 80% dos professores avaliados são formados em Química e 60% lecionam há menos de 1 ano na escola.

A Figura 1 apresenta o percentual de respostas quando os docentes foram questionados: Quais os recursos didáticos e a frequência utilizada pelo por você nas aulas de química?

Figura 1. Percentual de respostas quando os docentes foram questionados: Quais os recursos didáticos e a frequência utilizada pelo por você nas aulas de química?(A) Sempre; (B) Frequentemente; (C) Raramente.



Fonte: Autores, 2017.

Ao analisar Figura 1 (A), nota-se que cerca de 80% dos docentes citam que sempre usam o quadro e pincel como metodologia. Enquanto que 40% relatam utilizar com frequência apostilas, jogos e experimentos Figura 1 (B), esse mesmo percentual revelam que utilizam raramente vídeos, datashow, experimentos e modelos moleculares Figura 1 (C).

Conclusões

Com base nos resultados obtidos conclui-se que os docentes em sua maioria ainda adotam como principal metodologia o uso do quadro e pincel em suas aulas.

¹ EVANGELISTA, Y. S. P.; CHAVES, E. V. *Revista de Educação, Ciência e Tecnologia do IFAM*. 2016, número especial, 16.

² DORNELES, E. P. *VIII Encontro de Pesquisa em educação*. 2015



Química Computacional, Química Experimental e Ensino de Química

Lorrane Lima* (IC), Iza Fernanda Barbosa da Silva (IC), Jacqueline Moraes da Costa (PG), Railton Barbosa de Andrade (PQ)

Lima.lorrane@gmail.com

Departamento de Química, CCEN, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, PB, Brazil, 58.059-900.

Palavras Chave: *Química Computacional, Química Experimental, Softwares Livres.*

Introdução

Dentre os desafios que a Educação Química possui, dificilmente não podemos identificá-los como elementos importantes que devem fazer parte das discussões na formação dos professores de Química¹. Nesse contexto as Tecnologias Digitais da Informação e Comunicação (TDICs) podem contribuir para ampliar ou renovar o ensino tradicional, visando à produção de conhecimento², por exemplo, utilizando simulações, confecção de material didático, elaboração de vídeo aula e ensino não presencial. Além da utilização de todo aparato tecnológico é fundamental a participação do estudante. Implicações gerais sobre as tecnologias são reportadas nos PCN+ em que as novas tecnologias da comunicação e da informação permeiam o cotidiano, independente do espaço físico, e criam necessidades de vida e convivência que precisam ser analisadas no espaço escolar³. Esse trabalho tem por objetivo mostrar possíveis aplicações da Química Computacional na integração entre as disciplinas teóricas e experimentais do curso de licenciatura em Química da UFPA.

Resultados e Discussão

Inicialmente foi realizada uma pesquisa bibliográfica relacionando prováveis recursos tecnológicos que poderiam ser utilizados no auxílio das disciplinas (de caráter experimental) pertencentes a grade curricular de Química.

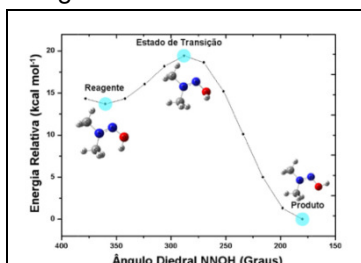


Figura 1: Representação de um mecanismo de reação.

Ao contrário do ensino tradicional, utilizando as TDICs pode-se personalizar o ensino por meio de Plataformas Digitais, como por exemplo: Ambiente criado no Moodle; Plataformas Adaptativas, como

Khan Academy; Google e complementos, como YouTubeEdu.

A Figura 1 representa um mecanismo de reação que pode ser mostrado utilizando ferramentas computacionais. Dessa forma podemos auxiliar no entendimento das modificações estruturais que os reagentes sofrem antes de se transformarem nos produtos.



Figura 2: Principais softwares utilizados.

A Química Computacional é a prova que a bancada de experimentos e o computador podem apresentar igualmente a mesma importância para o desenvolvimento da Química atualmente. A Figura 2 representa alguns softwares pesquisados neste trabalho que podem auxiliar no entendimento de conceitos e teorias relacionados com a Química. Entre as principais características destes softwares destacamos: todos são *softwares livre*; possibilidade de instalação no Windows, Linux e Mac.

Conclusões

A Química Computacional pode auxiliar no ensino de conceitos e teorias auxiliando no entendimento da relação entre a Teoria e a Prática Experimental realizada no laboratório. Ainda precisamos aumentar as pesquisas envolvendo software auxiliando no Ensino de Química.

Agradecimentos



¹ Maldaner, O. A. *A formação inicial e continuada de professores de Química*. Ijuí: Ed. Unijuí, 2000.

² Bacich, L.; Tanzi Neto, a.; Trevisani, F. M. *Ensino híbrido: personalização e tecnologia na educação*. Porto Alegre: Penso, 2015. p. 270.

³ BRASIL, Ministério da Educação. *PCN+ Ensino Médio: orientações educacionais complementares aos Parâmetros Curriculares Nacionais*. Brasília: MEC/Semtec, 2002.



CONTRIBUIÇÕES DO JOGO “LIGAÇÕES QUÍMICAS” NO PROCESSO ENSINO-APRENDIZAGEM: PERCEPÇÃO DOS ALUNOS

Carla D. M. Cavalcanti¹ (IC)*, Valeska A. dos Santos¹ (IC), Andreza G. de Souza¹ (IC), Dayse das Neves Moreira¹ (PQ), Maria Betania H. dos Santos¹ (PQ) *carladelania@hotmail.com

¹Departamento de Química e Física, Centro de Ciências Agrárias, Universidade Federal da Paraíba, Campus II, CEP 58397-000, Areia, PB, Brasil.

Palavras-Chave: Química, Jogos, Aprendizagem.

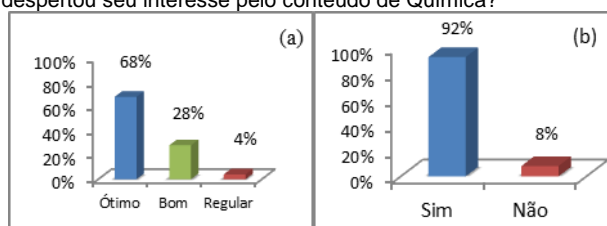
Introdução

O Ensino de Química é marcado principalmente pelo tradicionalismo, resumindo-se muitas vezes a abordagem de conteúdos abstratos, memorização de conceitos e fórmulas totalmente desvinculados do cotidiano, fazendo com que os alunos considerem a disciplina como maçante e de difícil compreensão. Além disso, a aprendizagem por muito tempo foi associada a repetição, sendo assim, os alunos que não aprendiam eram os únicos responsáveis pelo seu fracasso. No entanto, atualmente o insucesso do aluno também está relacionado ao trabalho executado pelo professor, pois, a motivação e interesse que este conseguir despertar em seus alunos se torna o diferencial. Dessa forma, a busca por metodologias capazes de beneficiar o processo de ensino-aprendizagem tem crescido nos últimos anos e é nesse contexto que está inserido o uso de jogos didáticos^{1,2}. Fazer uso de jogos no ensino de Química se constitui um potente recurso para auxiliar os alunos na aprendizagem, já que, apresenta diversos benefícios, como: indução do raciocínio, construção do conhecimento cognitivo, socialização dos alunos, desperta a curiosidade e o interesse, desenvolvimento físico, moral, intelectual, divertimento e principalmente aprendizagem de conceitos até então abstratos^{2,3}. Diante do exposto, o objetivo desta pesquisa foi analisar a percepção dos alunos sobre as contribuições do Jogo “Ligações Química” no processo ensino-aprendizagem. A pesquisa foi realizada na cidade de Areia-PB e o público alvo foram 22 alunos do 1º ano do ensino médio de uma escola estadual. Como instrumento de coleta de dados utilizou-se um questionário contendo questões objetivas e subjetivas.

Resultados e Discussão

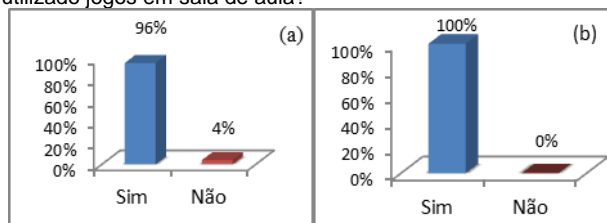
Ao analisar o gráfico (a) da Figura 1, observa-se que 96% dos alunos classificaram o jogo aplicado como ótimo ou bom e 4% afirmaram que o este contribuiu para despertar o seu interesse pelo conteúdo de Química (Figura 2 (b)).

Figura 1. Percentual de respostas quando os alunos foram questionados: (a) Como você classifica o jogo? (b) O jogo despertou seu interesse pelo conteúdo de Química?



Como pode ser observado na Figura 2 (a), quase a totalidade dos alunos afirmaram que o jogo ajudou no processo de aprendizagem e fixação do conteúdo e 100% apontam que o professor de Química nunca utilizou jogos em sala de aula.

Figura 2. Percentual de respostas quando os alunos foram indagados: (a) O jogo ajudou você no processo de aprendizagem e fixação do conteúdo? (b) Seu professor de Química já havia utilizado jogos em sala de aula?



Conclusões

Com base nos resultados apresentados pode-se concluir que o Jogo “Ligações Químicas” despertou o interesse dos alunos pelo conteúdo de química e contribuiu no processo de ensino-aprendizagem desta disciplina.

Agradecimentos

À CAPES/PIBID, a UFPB/CCA/DQF e a Escola participante

¹ BARROS, C. F. *Trabalho de conclusão de curso (Graduação em Licenciatura em Química)*. 2015.

² CUNHA, M. B. da. *Revista Química Nova na Escola*. 2012, 34, 92.

³ LIMA, E. C. Mariano, D. G.; Pavan, F. M.; Lima, A. A.; ARÇARI, D. P. *Revista Eletrônica Educação em Foco*, 2011.



MAPEAMENTO DA DISCIPLINA DE QUÍMICA ORGÂNICA NOS CURSOS DE LICENCIATURA EM QUÍMICA DAS IES FEDERAIS DO BRASIL

Rachel Azevedo Maia^{1*} (IC), Paulo César Geglio² (PQ), Dayse N. Moreira¹ (PQ).

*rachel-maia@hotmail.com

¹Departamento de Química e Física, Centro de Ciências Agrárias, Universidade Federal da Paraíba, Campus II, CEP 58397-000, Areia, PB, Brasil.

²Departamento de Fundamentação da Educação, Centro de Educação, Universidade Federal da Paraíba, Campus I, CEP 58051-900, João Pessoa, PB, Brasil.

Palavras Chave: Química Orgânica, Licenciatura em Química, Formação docente.

Introdução

A formação inicial de professores tem como estância oficial o curso de licenciatura.¹ Esses cursos no Brasil, desde sua criação, na década de 30 do século passado e até o momento, são influenciados pela implantação de diferentes leis e resoluções que alteram suas estruturas curriculares.² Diante disso, observamos que o currículo é um importante elemento no processo de reformulação do sistema educativo. Assim, apresentamos neste trabalho o resultado de um esforço investigativo a respeito da disciplina de Química Orgânica nos cursos Licenciaturas em Química, que são ofertados pelas IES federais do país. Realizamos um mapeamento das instituições e cursos, focalizando a matriz curricular de cada curso com o objetivo de perceber como a referida disciplina é contemplada em termos de nomenclatura, carga horária e integralização. Nossa intenção é contribuir para as discussões e pesquisas voltadas para o currículo dos cursos de formação de professores de Química.

Resultados e Discussão

Segundo o MEC o Brasil conta com 63 IES pertencentes ao sistema Federal de ensino. Dessas, 58, em diferentes *campi*, ofertam 79 cursos de Licenciatura em Química. A maior parte deles está localizada nas regiões Sudeste e Nordeste do país, sendo a primeira com 26 e a segunda com 21 cursos. As regiões Sul e Norte, aparecem na sequência, respectivamente com 16 e 9 cursos. Em quinto lugar, com 7 cursos, está a região Centro-Oeste. Todos os cursos contemplam a disciplina de Química Orgânica em sua matriz curricular. A carga horária, porém, apresenta uma variação que vai de 30 a 105 horas, com 8% dos cursos oferecendo a disciplina com menos de 60 horas e 19% deles com carga horária maior que 80 horas. A maioria dos cursos (73%), no entanto, a oferecem com carga

horária que vai de 60 a 75 horas, com predomínio maior para 60 horas (48%). Com relação ao momento do curso em que ela figura, percebemos que majoritariamente está situada no início e se estende até o meio do curso, com predomínio para o início. Em 40% dos cursos ela é ofertada no 3º período e em 22% no 2º período, o restante do percentual é distribuído entre o 4º, 5º e 6º períodos, com apenas 3% no 1º. Outra observação em nosso levantamento se refere à nomenclatura da disciplina. Há diferença entre as instituições, mas quase a totalidade delas contempla o binômio “química orgânica”: Química Orgânica 1 (77%). Fundamentos de Química Orgânica (7%); Química Orgânica Teórica (4%); 3% Química Orgânica Fundamental 1 (3%); 2% Química Orgânica A (2%); Química das Funções Orgânicas (1%); Introdução a Química Orgânica (1%); Química dos Compostos Orgânicos (1%); Funções e Reações Orgânicas (1%); Química Orgânica Básica A (1%); e Estrutura e Propriedade dos Compostos Orgânicos (1%).

Conclusões

O presente estudo se insere em um trabalho de pesquisa de maior abrangência, em desenvolvimento, que visa examinar com mais detalhes a abordagem dos saberes da disciplina de Química Orgânica no contexto dos cursos de Licenciatura em Química, ofertados pelas IES federais do país. Nesse momento, portanto, apresentamos contribuições iniciais focadas na carga horária e nomenclatura que revelam a existência de uma diversidade nos dois aspectos, porém também uma concentração.

Agradecimentos

Ao Prolicen/UFPB pelo apoio financeiro.

¹ Broietti, F.C.D.; Barreto, S.R.G. *Semina: Ciências Exatas e Tecnológicas*. **2011**, *32*, 181-190.

² Mesquita, N.A.S.; Soares, M.H.F.B. *Química Nova*. **2011**, *34*, 165-174.



Construção de modelos moleculares usando garrafas pet como metodologia alternativa para o ensino de química

Mayara Ferreira Barbosa (PG)*¹, Emanuella Santos Sousa (PG)¹, Ricardo Alexandre Cavalcanti de Lima (PQ)¹

¹Departamento de Química, Universidade Federal da Paraíba (UFPB)

Palavras Chave: ensino de química, modelos moleculares, metodologias alternativas, garrafa PET, funções orgânicas.

Introdução

Tornar os assuntos mais interessantes e menos abstratos é um desafio para os professores de química, pois a abordagem nem sempre é trivial para temas que necessitam de um conteúdo teórico intenso. Parte desse desafio pode ser vencido com o desenvolvimento da habilidade de representação do aluno, ou seja, com a construção de modelos moleculares para facilitar a visualização tridimensional do conhecimento químico. A utilização de modelos moleculares é de grande valia, pois apoia a visualização das ligações químicas, como também possibilita desenvolver no aluno a percepção do arranjo espacial destas¹. Sendo assim, este trabalho aborda a construção de modelos moleculares por meio de um material alternativo, a garrafa PET, para identificação das seguintes classes funcionais orgânicas: hidrocarbonetos, álcoois, aldeídos, cetonas, ácidos carboxílicos, éteres e ésteres.

Resultados e Discussão

O projeto foi aplicado em duas turmas de segunda série do ensino médio da Escola Estadual de Ensino Fundamental e Médio Professor Orlando Cavalcanti Gomes, situada em João Pessoa. Na turma 1 foi usado o método tradicional de ensino. Na turma 2 além da metodologia tradicional foi aplicada a alternativa proposta (**Figura 1**).

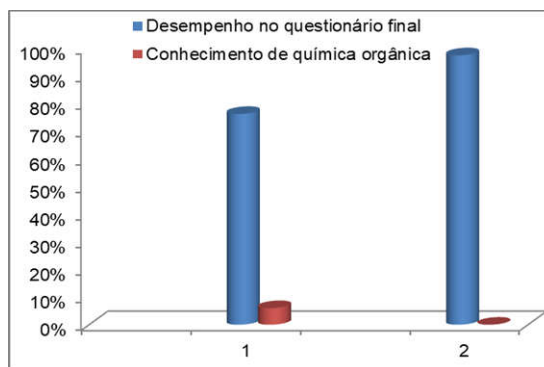
Figura 1. Turma em que houve a aplicação da metodologia alternativa.



5º Encontro de Química da UFPB

Foram aplicados dois questionários, um inicial de caráter investigativo e outro no final com teor avaliativo. De acordo com a **Figura 2** é possível observar que a turma 1 apesar de ter um conhecimento prévio sobre o assunto não obteve resultados tão satisfatórios quanto os da turma 2 em que foi aplicada a metodologia.

Figura 2. Desempenho das turmas analisadas.



Nesse sentido, foi verificado que o uso de modelos moleculares facilitou a assimilação das funções orgânicas, visto que a percentagem de acerto no questionário avaliativo foi consideravelmente maior para a turma em que o recurso alternativo foi aplicado.

Conclusões

A metodologia proposta mostrou-se como uma alternativa viável para uso como complementação às aulas tradicionais de química orgânica.

Agradecimentos

Ao professor de química Dr. Urijatan Teixeira que cedeu suas turmas para aplicação deste projeto.

¹ Lima, M. B; Neto, P. *Quím. nova esc.* **1999**, 6, 903.



Design Thinking na educação: desafios e perspectivas para o ensino de química

Sebastião Luiz da Silva Neto (IC)*, Bruno Silva Leite (PQ). sfldsn@gmail.com

Unidade Acadêmica de Serra Talhada, Universidade Federal Rural de Pernambuco.

Palavras Chave: Metodologias ativas, Design Thinking, Ensino de Química.

Tabela 1. Trabalhos envolvendo Design Thinking.

Nome	NC*	Ano	Área
Gestão estratégica de design com a abordagem em Design Thinking: Proposta de um sistema de produção de conhecimento.	19	2011	Educação
Design Thinking como metodologia de pesquisa para a concepção de ambiente virtual de aprendizagem centrado no usuário	5	2014	Educação Virtual
Design Thinking: Cognição e educação no século XXI.	2	2015	Ensino e psicologia
Uso do Design Thinking na licitação de requisitos de ambientes virtuais de aprendizagem móvel	3	2014	Educação Virtual
Design Thinking como metodologia alternativa para aprendizagem de jogos	3	2014	Educação eletrônica
Design Thinking: Contribuição para inovações estratégicas na educação.	1	2015	Gestão educacional

* Número de Citações.

Os resultados encontrados mostram que a interdisciplinaridade estava presente nas propostas apresentadas nas teses e artigos analisados.

Introdução

A necessidade de mudanças nas práticas pedagógicas é tema constante em discussões por pesquisadores e professores. Há um consenso de que a aprendizagem deve ser centrada no aluno, bem como suas metodologias devem levar em consideração este aspecto. A fim de contemplar tais mudanças nos últimos anos temos observado a inclusão de metodologias ativas no processo de ensino e aprendizagem. Dentre as possibilidades de abordagens, destaca-se o Design Thinking (DT).

O Design Thinking vem a com a proposta de mudanças na educação, e olhar um contexto mais amplo dos problemas envolvidos na aprendizagem em sala de aula. Sua principal característica é a inovação. Os alunos deixariam de ser apenas receptores da informação, passando a serem geradores de ideias, produzindo um conjunto de métodos com inúmeros processos, que são utilizados para identificar, analisar, abordar e assim solucionar problemas em sala de aula. O DT apresenta cinco características (Descoberta, Interpretação, Ideação, Experimentação e Evolução) que podem ser resumidas em três: Imersão, Ideação e Prototipagem¹.

Resultados e Discussão

A fim de compreender as produções sobre Design Thinking na Educação, realizamos uma pesquisa de caráter qualitativo², a partir do banco de dados do Google Acadêmico utilizando o corpus latente sobre conteúdo. O corpus latente é um modelo de investigação que analisa informações contidas na Internet, extraindo-as a partir da análise da própria Internet, ou seja, sobre o conteúdo disponível³.

Cabe destacar que por questão de limitação de espaço detivemo-nos em analisar apenas seis (6) artigos. O critério de escolha pautou-se no número de citações no Google Acadêmico.

A tabela 1 apresenta os resultados encontrados na busca de trabalhos envolvendo o uso do DT na educação.

Conclusões

Este trabalho, em caráter inicial, pode observar durante a pesquisa que nos trabalhos analisados o design thinking é considerado como uma abordagem, divergindo de trabalhos da área de negócios e do design que propõe o DT como uma metodologia. Além disso, os trabalhos destacam que o DT apresenta uma proposta para inovar os métodos de ensino aprendizagem tradicionalmente conhecidos por ser uma proposta centrada no aluno.

Agradecimentos

LEUTEQ, CNPq, UFRPE.

¹ Martins Filho, V., et al., *Revista Diálogo Educacional*, 2015, 15, 45.

² Lüdke, M., & André, M. E. 1986.

³ Pina, A. R. B., Souza, F. N., & Leão, M. C. *Revista Eletrônica de Educação*, 2013, 7, 2.



Investigando o Ensino Híbrido no ensino de química

Bruna Rafaela F. da Silva*(IC) e Bruno Silva Leite (PQ). bruna_gglm@outlook.com

Unidade Acadêmica de Serra Talhada, Universidade Federal Rural de Pernambuco.

Palavras Chave: Metodologias ativas, Ensino Híbrido, Ensino de Química, Tecnologias no Ensino de Química.

Introdução

A palavra “híbrido” se refere a uma mistura, e quando se aplica esta palavra ao ensino, formando assim o ensino híbrido, queremos falar sobre uma nova perspectiva de aprendizagem, isto é, introduzir a tecnologia na educação, inovando tanto na forma como se ensina, quanto no que se aprende¹. É possível mostrar que através da inclusão da tecnologia, pode-se obter um bom percentual de aproveitamento em sala de aula e que o intuito de se abordar sua utilização em sala está relacionado com a necessidade e as dificuldades que os professores têm em encontrar meios que façam seus alunos se interessarem pelo conteúdo abordado².

O ensino híbrido vem como uma tentativa de responder alguns questionamentos feitos por muitos anos em sala de aula, por exemplo: Como melhorar o desempenho dos discentes? Como tornar a aula mais atrativa? Ao juntar as novas tecnologias ao ensino, uma vez que já são bastante utilizadas pelos alunos, tem-se aí uma aliada para o aprendizado, a tecnologia que antes poderia não ter uma função significativa para a relação aluno-professor, agora pode interligá-los através de uma dinâmica proposta pelo próprio professor. Dinâmica esta, que irá funcionar tanto de forma virtual como presencial.

Resultados e Discussão

Inicialmente, a partir do levantamento no *Corpus* latente da Internet³, realizamos uma pesquisa qualitativa buscando em três plataformas que agregam diversos periódicos, teses e dissertações (Biblioteca Nacional, Periódico CAPES e *Scielo*), as palavras-chave: Ensino híbrido, *blendend learning*, *b-learning* e aprendizagem mista. O corpus latente é um modelo de investigação que analisa informações contidas na Internet, extraindo-as a partir da análise da própria Internet, ou seja, sobre o conteúdo disponível.

Os resultados do estudo sugerem que o ensino híbrido é uma metodologia ativa que vem sendo explorada em alguns âmbitos educacionais de forma muito incipiente, principalmente quando observamos na área de Ensino. A tabela 1 descreve os resultados iniciais de nossa pesquisa.

Tabela 1. Trabalhos envolvendo o Ensino Híbrido.

Áreas	Biblioteca Nacional	Periódico CAPES	Scielo
Educação	0	14	3
História	0	1	0
Administração	0	1	0
Inglês	0	1	0
Engenharia	0	2	0
Química	0	0	0

Os dados permitem observar que há trabalhos na área da Educação, contudo esta área compreende diversos âmbitos de pesquisas, o que não nos permite classificar qual área do conhecimento está sendo abordada, assim constituindo em nossa pesquisa uma área “geral”. Em relação ao ensino híbrido no contexto da química, nossos resultados indicam não haver nenhum trabalho nas plataformas investigadas. Tal resultado abre perspectivas para a realização de pesquisas utilizando esta metodologia no ensino de química.

Conclusões

Esta pesquisa, em fase inicial, possibilitou identificar algumas áreas que estão abordando o ensino híbrido como uma metodologia ativa. Nesse sentido consideramos importante discutir as possibilidades e as vantagens de se aplicar esta metodologia em sala de aula, de modo que essa aplicação possa contribuir para que os docentes organizem suas aulas. Ademais, ao não encontrarmos propostas envolvendo o ensino híbrido no ensino de química, destacamos que tais resultados abrem espaço para abordagens dessa metodologia nas práticas docentes. Sabendo que as características deste modelo de aprendizagem se difere do modelo de aula “tradicional” que muitos professores ainda conservam, em que as aulas são expositivas e que o aluno não tem autonomia para construir seu conhecimento.

Agradecimentos

PIC-UFRPE, LEUTEQ.

¹ Bacich, L., Neto, A. T., & Trevisani, F. 2015.

² Leite, B. S. Tecnologias no ensino de química, 2015.

³ Pina, A. R. B., Souza, F. N., & Leão, M. C. *Revista Eletrônica de Educação*, 2013, 7, 2.



EXPERIMENTAÇÃO COM MATERIAIS ALTERNATIVOS: UM RECURSO DIDÁTICO AUXILIAR NO ENSINO DE SEPARAÇÃO DE MISTURAS.

Izabella Remigio Agra^{1*} (IC), Maria Betania Hermenegildo dos Santos¹(PQ). *izaagra@hotmail.com

¹Departamento de Química e Física. Centro de Ciências Agrárias, Universidade Federal da Paraíba Campus II. CEP 58397-000. Areia. PB. Brasil.

Palavras-Chave: Química, Atividade experimental.

Introdução

Pesquisas tem revelado que para ensinar química os docentes devem buscar metodologias que relacionem os conteúdos ministrados em sala de aula com situações do dia a dia do aluno. Dentre essas metodologias vem-se destacando a experimentação, como recurso auxiliar capaz de melhorar o desempenho dos alunos, pois, o auxilia na investigação, no aprimoramento do desenvolvimento cognitivo, levando-o à reflexão, compreensão e discussão sobre seu mundo e a química envolvida^[1,2]. Porém, na maioria das escolas públicas brasileiras os laboratórios quando não ausentes, estão sucateados devido à falta de investimentos dos órgãos públicos. Uma estratégia interessante para sanar esse problema, é a utilização da experimentação com materiais alternativos e de baixo custo na própria sala de aula. Ante o exposto o objetivo desta pesquisa foi avaliar a utilização da experimentação com materiais alternativos como um recurso didático auxiliar no ensino de separação de misturas^[3,4]. A pesquisa foi realizada no Centro de Ciências Agrárias (CCA), da Universidade Federal da Paraíba, Areia – PB, o público alvo foram alunos do cursinho pré-vestibular oferecido pelo CCA a partir de um projeto de extensão. O levantamento dos dados foi realizado a partir da aplicação de um pré-teste aplicado com o intuito de avaliar o conhecimento prévio dos alunos e pós-teste com a finalidade de avaliar a atividade experimental e a sua eficácia.

Resultados e Discussão

Na Figura 1, encontra-se o percentual de acertos das questões aplicadas no pré e no pós- teste. A partir da análise desta Figura nota-se uma evolução conceitual dos alunos participantes da pesquisa, uma vez que, é nítido o aumento na quantidade de acertos após a aplicação da atividade experimental. De acordo com o apresentado na Figura 2, 80% dos alunos questionados afirmaram que a atividade experimental despertou o seu interesse pelo

conteúdo de química e 100% revelam que esta contribui no processo de aprendizagem e fixação do conteúdo.

Figura 1. Percentual de acertos das questões aplicadas no pré e no pós- teste.

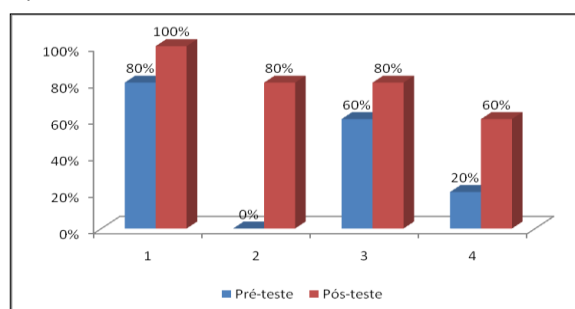
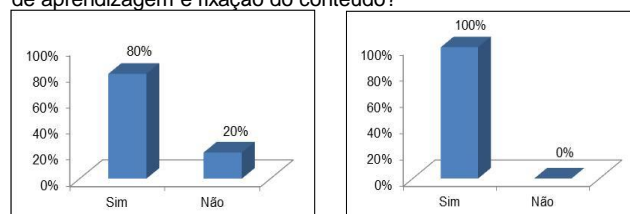


Figura 2. Percentual de respostas quando os alunos foram questionados a experimentação utilizada: (a) despertou o seu interesse pelo conteúdo de química? (b) ajudou você no processo de aprendizagem e fixação do conteúdo?



Conclusões

Ante os resultados obtidos, pode-se concluir que a experimentação realizada com materiais alternativos na própria sala de aula foi capaz de despertar o interesse dos alunos e auxiliá-los no processo de aprendizagem e fixação do conteúdo ministrado.

^[1] OLIVEIRA, A. R. *Proposta metodológica para o ensino da Química através de projetos, em uma escola pública de Santa Rita PB.* 2014. 60.

^[2] SILVA, R. T. et al. *Ensaio Pesquisa em Educação em Ciências*, 2009, 11, 245-261.

^[3] FREITAS, O. *Equipamentos e materiais didáticos.* 2009. 132.

^[4] NOVAIS, J. N., SILVA, I. F. M. *V Encontro Nacional das Licenciaturas.* 2014.



Prática de Ensino de Química: um olhar para os artigos publicados no periódico *Experiências em Ensino de Ciências*

Edvaldo de Souza Silva^{1*} (IC), Isadora Maria Gouveia Andrade (IC)¹, Rachel Azevedo Maia (IC)¹, Paulo César Gaglio² (PQ), Dayse das Neves Moreira¹ (PQ).

*valvicente.dm@hotmail.com

¹Departamento de Química e Física, Centro de Ciências Agrárias, Universidade Federal da Paraíba, Campus II, Areia, PB, Brasil. ²Departamento de Fundamentação da Educação, Centro de Educação, Universidade Federal da Paraíba, Campus I, João Pessoa, PB, Brasil

Palavras Chave: *Prática de ensino, Química, Mapeamento.*

Introdução

O compreender discente em relação à natureza pedagógica das aulas de Ciências Naturais, vem sendo bastante investigada com diferentes finalidades e com variadas abordagens teóricas e metodológicas.¹ Vários fatores interferem nos resultados que esperamos do processo de ensino e da aprendizagem. As condições estruturais da instituição de ensino, as condições de trabalho dos docentes, as condições sociais dos estudantes, os recursos disponíveis são algumas delas. Outro fator, não menos importante, é o das práticas de ensino utilizadas pelos docentes, as quais devem ser capazes de sensibilizar e de envolver os estudantes durante o processo de construção do conhecimento.² Desta forma, emerge a seguinte questão: como a prática de ensino de química vem sendo discutida no âmbito das produções científicas? Assim, apresentamos neste trabalho um recorte dos resultados do mapeamento e análise dos artigos que tratam da Prática de Ensino de Química no periódico *Experiências em Ensino de Ciências* (EEnCi).

Resultados e Discussão

Inicialmente, realizamos o mapeamento das produções que discutem sobre ensino de química na revista EEnCi, o que resultou num total de 46 artigos, no período de 2007 a 2016. A partir desta análise, verificamos que 23 publicações, discutem Práticas de Ensino de Química. Podendo assim, classifica-las em subcategorias, área de atuação e nível de ensino. Observando essa classificação das subcategorias, notamos que 35% das publicações estão voltadas para a Experimentação de Química, 17% com temas geradores como a água e história da química, 13% de atividades lúdicas, 9% de aprendizagem significativa, 9% situações problema, 9% oficinas demonstrativas, 4% atividade inclusiva

e 4% envolvendo experimentos computacionais, dessa forma revelando que as atividades experimentais tem maior porcentagem nas publicações como observado na figura 1. Observando as áreas de atuação, enfatizamos a Química Orgânica que com 35% esteve presente em todas as atividades experimentais das subcategorias, também com 35% estão às atividades com multiconteúdos, seguindo com 22% Química Geral, 4% Química Analítica e 4% Físico-Química. Por último, a análise relacionada ao nível de ensino, 65% das práticas foram aplicadas no ensino médio, 31% no ensino superior e 4% no ensino fundamental.

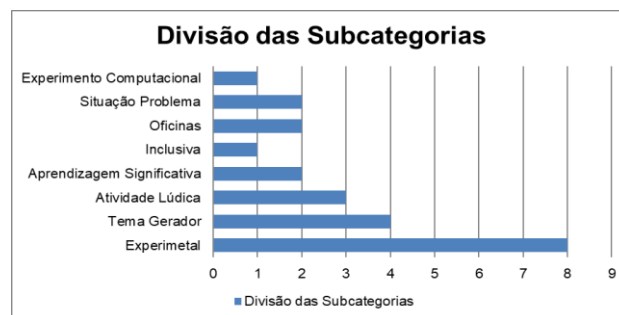


Figura 1: Divisão das Subcategorias Analisadas.

Conclusões

A partir da análise realizada no periódico EEnCi verificamos a existência de um número limitado de produções voltados para a prática de ensino de química, as quais enfocam principalmente a utilização da experimentação como estratégia de ensino.

Agradecimentos

Ao Probex/UFPB pelo apoio financeiro.

¹ Broietti, F.C.D.; Barreto, S. R. G. *Semin., Ciênc. Exatas Tecnol.* **2011**, 32, 181.

² Freitas Filho, J.R.; de Freitas, J.J.R.; Freitas, J.C.R.; Freitas, L.P.S.R. *Exp. Ens. Ciênc.* **2015**, 10, 1.



ANÁLISE FÍSICO-QUÍMICA DA QUALIDADE DE ÁGUA DE UMA CACIMBA LOCALIZADA NO MUNICÍPIO DE AREIA-PB

Gabryella Freire Monteiro^{1*} (IC), Camila Macaúbas da Silva¹ (IC), Tereziana Silva da Costa¹ (TC), Maria Betania Hermenegildo do Santos¹ (PQ) *gabyfreire25@hotmail.com

¹Departamento de Química e Física, Centro de Ciências Agrárias, Universidade Federal da Paraíba, Campus II, CEP:58397-000, Areia, Paraíba, Brasil.

Palavras-Chave: Água, análise físico-química.

Introdução

A água subterrânea é considerada uma fonte de abastecimento para consumo humano, pode ser captada no aquífero artesiano onde sua contaminação é mais difícil, ou no aquífero livre, que fica mais vulnerável à contaminação¹. Os principais fatores dessa contaminação são: despejos domésticos, industriais e chorume proveniente de aterros sanitários². O consumo de água contaminada tem sido relacionado com doenças gastrointestinais e tem acometido indivíduos com baixa resistência a morte¹. Diante disso, o objetivo desta pesquisa foi realizar a análise físico-química da água de uma cacimba localizada na cidade de Areia - PB. As análises foram realizadas no Laboratório de Química Analítica da UFPB/CCA, Campus II, localizado na cidade de Areia-PB. Foram analisados na amostra: pH, utilizando pHmetro Modelo Luca-210-MS TECNOPON, turbidez, utilizando Turbidímetro digital Modelo DLT-WV DEL LAB, condutividade elétrica, utilizando Condutivímetro Luca-150 – LUCADAMA, oxigênio dissolvido, utilizando Medidor de oxigênio dissolvido Modelo DO 5519-LUTRON, teor de sódio, cálcio e potássio, utilizando Fotômetro de Chama Modelo 910M ANALYSER, alcalinidade, dureza e cloratos através de métodos titulométricos condizentes com a literatura³.

Resultados e Discussão

Os resultados obtidos no presente estudo estão dispostos na Tabela 1. A quantificação dos parâmetros foi comparada com o disposto na Portaria nº 2914/2011 do Ministério da Saúde e na Resolução nº 357/2005 do CONAMA^{4,5}. O valor obtido para o pH não condiz com o permitido pela legislação. Resultados similares foram obtidos para o pH durante a avaliação físico-química da água de outra cacimba também localizada no município de Areia⁶. O índice de turbidez obtido na avaliação está acima do valor máximo aceito assim como na análise de águas de poços diferentes da região sul de Santa Catarina onde se constatou que os valores elevados da turbidez podem ter sido causados por

se tratar de uma água rica em íons de ferro, que alteram a cor e por consequência inferem negativamente na turbidez devido à sua propriedade de absorver luz⁷.

Tabela 1. Resultados das análises realizadas nas amostras de água coletadas na cacimba da cidade de Areia - PB.

Parâmetro	Amostra	VMP *
Cloratos (mg/L Cl)	1,16	250
Dureza total (mg/L CaCO ₃)	24,27±3,23	500
pH	5,86±0,46	6,0 a 9,5
Turbidez (UNT)	49,47±0,31	40
Sódio (mg/L)	13	200
Alcalinidade total (mg/L CaCO ₃)	14,33±0,58	Não objetável
Temperatura (°C)	22	Não objetável
Condutividade elétrica (µs/cm)	88,01±0,30	Não objetável
Oxigênio	7,20±0,10	Não objetável
Cálcio (mg/L)	2	Não objetável
Potássio (mg/L)	2	Não objetável

* Valor máximo permitido

Conclusões

É possível afirmar que a avaliação dos parâmetros físico-químicos da água proveniente de uma cacimba da cidade de Areia-PB gerou índices condizentes com a Portaria nº 2914/2011 do Ministério da Saúde e pela Resolução nº 357/2005 do CONAMA, com exceção do pH e da turbidez.

¹ SILVA, R. C. A.; ARAÚJO, T. M. *Ciência e Saúde Coletiva*. 2003, 8, 1019.

² FREITAS, M. B.; ALMEIDA, L. M. *X Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas*. 1998.

³ FUNASA - Fundação Nacional de Saúde. *Manual Prático de Análise de Água*. 2004, 146.

⁴ MINISTÉRIO DA SAÚDE. *Portaria nº 2914*, de 12 de dezembro de 2011.

⁵ CONSELHO NACIONAL DO MEIO AMBIENTE – CONAMA. *Resolução nº 357*, de 17 de março de 2005.

⁶ MONTEIRO, G. F. et al. *II Congresso Nacional de Pesquisa e Ensino em Ciências*. 2017.

⁷ VIEGAS, G. *Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em química)*. 2005.



A composição química dos alimentos como temática para o ensino de Química: uma abordagem na perspectiva CTSA.

Ana Rosa da Silva Neta^{1*} (IC) e Kátia Messias Bichinho¹ (PQ)

¹ Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, Paraíba
* ana.rosa_silva@hotmail.com

Palavras-chave: ensino de Química, composição química de alimentos, CTSA.

Introdução

A Química é uma ciência que se apresenta como uma das bases para o desenvolvimento científico e tecnológico mundial, com relevante impacto nas diversas áreas da sociedade, inclusive economia e política. Apesar disso, na escola, o aluno interage com os conteúdos de Química de forma desconectada do cotidiano¹. Restrepo defende que a perspectiva CTSA (Ciência-Tecnologia-Sociedade-Ambiente) proporciona uma orientação para a educação a partir de perspectivas múltiplas do conhecimento e do meio social, ambiental e cultural, oportunizando a construção rigorosa do conhecimento por meio da argumentação, diálogo e debates². Ainda, promove uma formação centrada na atitude crítica, reflexiva e responsável para a resolução de questões sociais relacionadas à ciência e tecnologia. Nesse contexto, o presente trabalho objetivou explorar os conceitos químicos curriculares do terceiro ano do ensino médio usando a composição química dos alimentos como temática, tendo a perspectiva CTSA como ferramenta didática. Para tanto, foi necessário conhecer a rotina alimentar dos alunos visando direcionar uma abordagem contextualizada dos conteúdos de Química. Além disso, discutir conceitos de educação alimentar com os alunos, incentivando-os a abordar o assunto com seus familiares, tendo como finalidade estimular a mudança para hábitos alimentares mais saudáveis.

A escolha das escolas públicas e privadas e das turmas participantes foi feita mediante sorteio, visando a maior abrangência de classes sociais. A análise dos questionários respondidos pelos alunos evidenciou as classes de alimentos mais presentes na rotina alimentar dos alunos, permitindo escolher substâncias químicas para conduzir a abordagem na perspectiva CTSA.

Resultados e Discussão

O número total de alunos entrevistados foi 75, sendo 33 alunos do grupo A (escolas públicas localizadas em bairros mais humildes), 13 alunos do grupo B (escolas públicas localizadas em bairros mais centrais) e 29 alunos do grupo C (escolas particulares com menor valor de mensalidade). Destes, 55% são do sexo feminino e 45 % do sexo

masculino. A idade dos alunos varia entre 16 e 20 anos, mas 82% têm entre 17 e 18 anos, mostrando que a maior parte dos alunos entrevistados estão em idade regular para cursar o terceiro ano do nível médio.

A partir da análise dos questionários, foi possível escolher algumas classes de substâncias químicas (aminoácidos, edulcorantes, conservantes) que compõem os alimentos naturais e industrializados regularmente consumidos pelos alunos (Figura 1), para embasar as subseqüentes abordagens dos conteúdos curriculares, facilitar o entendimento dos conceitos químicos em sala de aula e incentivar as discussões sobre hábitos alimentares no ambiente doméstico e social dos alunos.

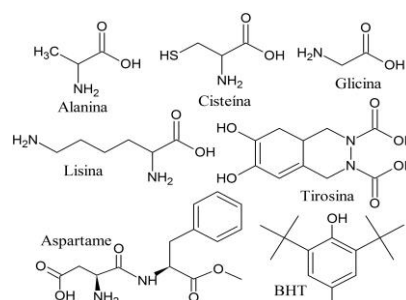


Figura 1 – Estruturas químicas de algumas das substâncias mais presentes na alimentação dos alunos.

Conclusões

A temática composição dos alimentos mostra-se dinâmica para estimular os alunos para o estudo de conceitos químicos, permite abordagens com o objetivo de aprimorar o senso crítico para construir bases sólidas de conhecimento científico, visando a tomada de decisões para melhoria constante dos hábitos alimentares.

Agradecimentos

UFPB e CNPq.

¹Ministério da Educação. PCN's (Ensino Médio). Disponível em <http://portal.mec.gov.br/seb/arquivos/pdf/blegais.pdf>. Acesso em 24/08/2017.

²Restrepo, M. M. C. Seminário Ibero-Americano Ciência-Tecnologia-Sociedade no Ensino das Ciências, 2010. Disponível em http://aia-cts.web.ua.pt/?page_id=61. Acesso em 25/08/2017.



Discriminação de respostas metabólicas de *Staphylococcus aureus* submetidas a nanopartículas de prata

Rayane P. Lima¹ (IC)*, Heloiza F. O. Silva¹ (PG), Edgar P. Moraes¹ (PQ), Luiz H. S. Gasparotto¹ (PQ).

¹ Grupo de Química Biológica e Quimiometria, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Av. Senador Salgado Filho 3000, Lagoa Nova, Campus Universitário, CEP 59078-970 – Natal/RN

*e-mail: rayane-lima015@hotmail.com

Palavras Chave: Nanopartículas de prata, hclato de doxiciclina, bactéria, análise de componentes principais.

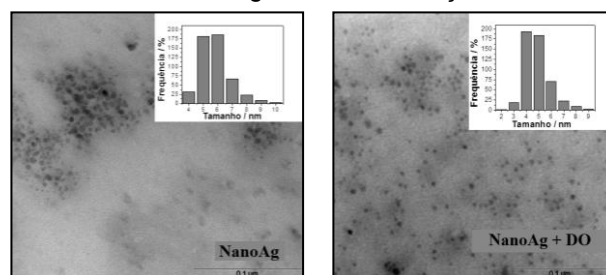
Introdução

A resistência bacteriana é uma problemática mundial que vem exigindo a proposição de novos agentes antibacterianos. A prata coloidal voltou à cena com dois papéis de destaque: (I) como agente bacteriano e (II) carregando antibióticos com possível efeito sinérgico¹. Com relação a última abordagem em trabalho anterior nosso grupo de pesquisa mostrar a sinergia do efeito antimicrobiano de nanopartículas de prata, NanoAg, quando combinadas ao hclato de doxiciclina, DO, contra *Escherichia coli*². Com o intuito de se entender mais profundamente aquele efeito sinérgico, neste trabalho foi utilizada a técnica de FTIR-ATR aliada a análise por componentes principais, ACP, para se verificar o padrão de resposta metabólica da bactéria *Staphylococcus aureus* (ATCC 25923) após ser tratada com NanoAg, DO e NanoAg+DO.

Resultados e Discussão

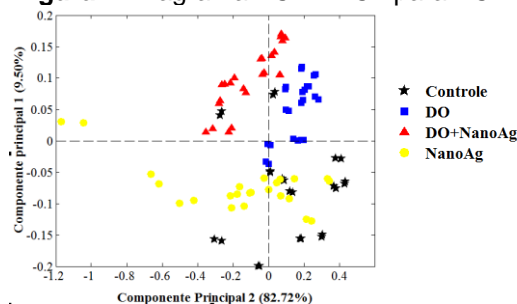
As NanoAg utilizadas neste estudo apresentaram apenas uma banda de plasmon de superfície com absorção máxima em 401 nm, a solução coloidal apresentou coloração amarela persistente. Imagens coletadas por meio de microscopia eletrônica de transmissão confirmaram a forma esférica das NanoAg, bem como que a combinação com DO não provocou desestabilização pronunciada. A Figura 1 mostra que o tamanho médio antes da adição foi 5,32 nm \pm 1,02 nm e após foi 4,32 nm \pm 1,02 nm, e que não houve mudança na forma das NanoAg. Isso é um fator importante para a aplicação e comparação dos efeitos. As NanoAg, DO e NanoAg+DO foram aplicados em *S. aureus* e espectros brutos das bactérias, antes e após contato com NanoAg, foram obtidos e pré-processados cortando na faixa de 1800-900 cm⁻¹ e centrado na média. O modelo ACP foi construído com 96 amostras (24 amostras de cada classe), usando 4

Figura 1. Imagens de MET e distribuição de tamanho das NanoAg com e sem adição de DO.



componentes principais, CPs o que explicou 97,6% da variância total. A Figura 2 mostra que foi possível identificar 4 grupos distintos. As diferenças vistas

Figura 2. Diagrama PC1 x PC2 para ACP.



por meio da ACP não foram detectadas por análise visual dos espectros de FTIR-ATR das amostras. Isso remete a diferentes respostas metabólicas das bactérias frente aos tratamentos utilizados neste estudo.

Conclusões

FTIR-ATR associada à ferramenta estatística de ACP mostrou-se eficiente na diferenciação das respostas metabólicas após os três tipos de tratamento das bactérias (DO, NanoAg+DO e NanoAg).

¹ Morones-Ramirez, J. T.; et al. *Sci Transl Med.* **2013**, *5*, 190.

² Silva, H. F.O.; et al. *RSC Adv.* **2015**, *5*, 66886.



Detecção colorimétrica da Demanda Química de Oxigênio: um sensor baseado em papel funcionalizado com nanopartículas de prata

Eryka T. D. Nóbrega¹ (IC)*, Heloiza F. O. Silva¹ (PG), Anderson D. Viana¹ (PG), Luiz H. S. Gasparotto¹ (PQ), Edgar P. Moraes¹ (PQ).

¹Grupo Química Biológica e Quimiometria, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Av. Senador Salgado Filho 3000, Lagoa Nova, Campus Universitário, CEP 59078-970 – Natal/RN.

*e-mail: erykanobrega4@gmail.com

Palavras Chave: demanda química de oxigênio, sensor, nanopartículas de prata, processamento de imagem.

Introdução

Nanopartículas de prata (AgNPs) podem produzir saídas visíveis para detecção colorimétrica de compostos sendo, portanto, promissoras no desenvolvimento de sensores¹. Em nosso último trabalho, mostramos a propensão das AgNPs à sulfidação em ambientes ricos em matéria orgânica². Nesse trabalho, relatamos um estudo sobre a influência dos fatores de controle no processo de funcionalização de sensores visando à detecção colorimétrica da Demanda Química de Oxigênio (DQO). Além disso, aplicamos Análise por Componentes Principais (PCA) no conjunto de dados de imagem referente aos sensores otimizados após contato com amostras de águas com diferentes DQO.

Resultados e Discussão

As AgNPs foram sintetizadas como descrito por Gasparotto e colaboradores³. Um planejamento fatorial completo 2³ (pacotes *qualityTools* e *rsm*) foi simulado utilizando o Software livre R 3.3.1, da The R Foundation for Statistical Computing 2017 e os fatores avaliados foram: gramatura (X_1), concentração de AgNPs (X_2) e número de camadas aplicadas na superfície do substrato (X_3), a resposta foi absorbância resolvida para o canal B (azul). Na Figura 1, são apresentados gráficos da superfície de resposta (modelo de segunda ordem $R^2 = 0,954$). Os valores máximos de absorbância resultam das combinações entre o nível mínimo do fator X_1 e dos níveis máximos dos fatores X_2 e X_3 . Os efeitos principais de X_1 , X_2 e X_3 , assim como as interações binárias $X_1:X_2$ e $X_2:X_3$ foram significativos ao nível de confiança de 95%. O modelo de PCA (pacote *ChemometricswithR*) foi construído com dados de imagens dos sensores otimizados, os quais foram submetidos a 3 amostras de esgoto coletadas nos pontos: esgoto bruto (EB), decantador secundário (DS) e esgoto tratado caixa (ETC) na Estação de Tratamento de Esgoto da Universidade Federal do Rio Grande do Norte. Usando 2 componentes principais 99,7% da variância total foi explicada. Na figura 2, é possível identificar 3 grupamentos.

Figura 1. Gráficos de superfície de resposta do modelo de segunda ordem para os fatores estudados.

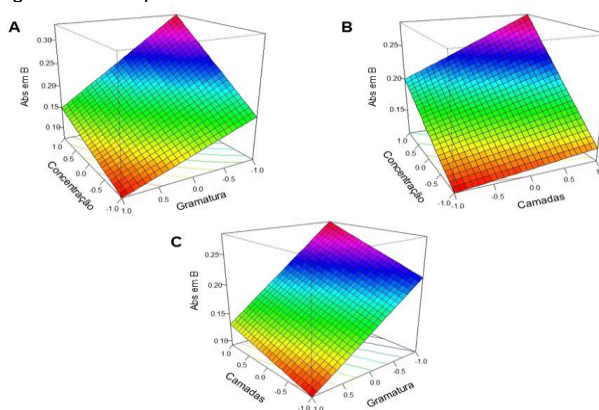
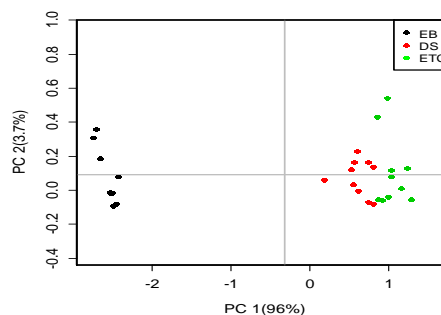


Figura 2. Gráfico dos scores das duas componentes principais.



Conclusões

O planejamento fatorial indicou que a absorbância do sensor era afetada, principalmente, pela gramatura do substrato e concentração de AgNPs. O modelo PCA assegura que AgNPs podem ser sensíveis na determinação da DQO, além de subsidiar a realização de novos estudos do sensor como uma ferramenta alternativa na avaliação das condições de balneabilidade dos corpos hídricos.

Agradecimentos

PROPESQ-UFRN pelo apoio financeiro.

¹Rivero, P. J.; Ibañez, E.; Goicoechea, J.; Urrutia, A.; Matias, R. I. e Arregui, F. J. *Sensors and Actuators. B: Chemical*, 2017, 251, 98-107.

²Costa, I. D.; Neto, A. O. W.; Silva, H. F. O.; Moraes, E. P.; Nóbrega, E. T. D.; Sant'Anna, C.; Eugenio, M. e Gasparotto, L. H. S. *Journal of Nanomaterials*, 2017, 2017, 1-8.

³Gasparotto, L. H. S.; Garcia, A. C.; Gomes, J. F.; Tremiliosi-Filho, G. *Journal of Power Sources*, 2012, 218, 73-78.



Uma metodologia para determinação de carbendazim em frutas por voltametria de onda quadrada

Flaviana. J. R. Severo^{1*}, Samantha D. Coiado¹, Edilene D. T. Moreira², Mário C. U. Araújo¹ e Kátia M. Bichinho¹

* flavianajust@yahoo.com.br

¹Universidade Federal da Paraíba – João Pessoa/PB, ²Universidade Federal da Paraíba – Areia/PB

Palavras-chave: carbendazim, eletrodos quimicamente modificados, voltametria, frutas

Introdução

O aumento da produção de alimentos tem impulsionado o uso de pesticidas para o controle de pragas agrícolas, em nível mundial. No Brasil, os teores máximos permitidos para resíduos de pesticidas em alimentos são estabelecidos pela Agência Nacional de Vigilância Sanitária (ANVISA)¹. Para o cultivo de frutas, carbendazim (MBC), um pesticida carbamato, está entre os mais utilizados. A ANVISA estabelece como ingestão diária aceitável (IDA) o valor máximo de 0,02 mg kg⁻¹ de MBC em relação ao peso corporal. MBC, *methyl benzimidazol-2-yl carbamate*, é um fungicida sistêmico, classe toxicológica III, que tem aplicação foliar em citros regulamentada no Brasil. A determinação de MBC por voltametria em frutas requer a extração do analito, pois há diferentes compostos que são interferentes, como o ácido cítrico, preparação que também resulta em pré-concentração do analito.

Neste trabalho, a técnica de extração QuEChERS foi utilizada para determinação de MBC em frutas por voltametria de onda quadrada, empregando o eletrodo de pasta de carbono modificado com nanotubos funcionalizados desenvolvido por Lúcio².

Para as amostras de maçã, laranja, e abacaxi estudadas, seguiu-se procedimento de extração QuEChERS descrito na literatura³, acrescido da secagem em atmosfera de nitrogênio e redissolução das amostras em H₂SO₄ 0,1 mol L⁻¹. Medidas voltamétricas foram realizadas em potenciostato/galvanostato modelo μ-Autolab com célula de análise Metrohm 663 VA Stand, eletrólito suporte H₂SO₄ 0,1 mol L⁻¹ e eletrodos de Ag/AgCl e fio de platina como de referência e auxiliar, respectivamente.

Resultados e Discussão

Para a curva analítica, a faixa de linearidade obtida foi de 2,43 × 10⁻⁷ a 2,0 × 10⁻⁶ mol L⁻¹, R² = 0,9942, com limites de detecção e quantificação de 8,24 × 10⁻⁵ e 2,75 × 10⁻⁴ mol L⁻¹, respectivamente. A extração QuEChERS possibilitou recuperações de 109 %, 98,2 % e 108 % para laranja, abacaxi e maçã, respectivamente.

Não foi detectado resíduo de MBC nas amostras de abacaxi analisadas. Concentração residual de MBC igual a 60 ± 2 μg kg⁻¹ foi encontrada nas amostras de maçã. Para as laranjas, o teor residual de MBC foi de 803 ± 34 μg kg⁻¹, valor que excede o máximo de ingestão diária permitido para indivíduos que possuem peso corporal de até 40 kg.

Por fim, não foram identificados interferentes nos voltamogramas, evidenciando a eficiência do procedimento QuEChERS adotado, com destaque à necessidade da preparação prévia do analito para as aplicações propostas.

Conclusões

A extração QuEChERS foi adequada para a determinação de MBC em laranjas, abacaxis e maçãs. O método desenvolvido é promissor para aplicação em outras matrizes. O teor de MBC nas amostras de laranjas excede o permitido na legislação para ingestão diária de indivíduos de até 40 kg de peso corporal.

Agradecimentos

CNPq, INCTAA, CAPES, UFPA, LAQA

¹ANVISA. Agência Nacional de Vigilância Sanitária. Disponível em <http://Anvisa.gov.br/AGROSIA/asp/fm_dados_agr_otoxico.asp >. Acesso em 10/11/2016.

²LÚCIO, M. M. L. M. Tese de doutorado. 2015, 115 pág. Universidade Federal da Paraíba.

³Prestes, O. D.; Adaime, M. B.; Zanella, R. *Scientia Chromatographica* 2011 3(1) 51-64.



Metodologia para a determinação do grau desacetilação da quitosana grau médico utilizando espectroscopia NIR e quimometria.

Pedro Queiroz Guimarães^{1,2}(PG)*, Erivan Pereira da Silva Junior¹(IC), Adriele Gomes da Silva¹(IC), Wandson Lukas do Nascimento Amorim¹(IC), Marcus Vinícius Lia Fook²(PQ), Simone da Silva Simões¹(PQ) pedro.qi@gmail.com.

¹Universidade Estadual da Paraíba, Campus I, Centro de Ciências e Tecnologia, Departamento de Química, Campina Grande – PB

²Universidade Federal de Campina Grande, Laboratório CERTBIO, Campina Grande – PB.

Palavras Chave: Qualidade, Regressão em mínimos quadrados parciais, Espectroscopia.

Introdução

A quitosana e seus derivados vêm sendo difundida como biomaterial em diversas áreas. Nas áreas de biomedicina e farmácia seu emprego está diretamente relacionado aos seus efeitos biológicos, tais como antioxidante, anti-inflamatório, anticancerígeno, etc. Para que uma matéria prima possa ser empregada na confecção de produtos biomédicos é necessário sua completa caracterização, a fim de atender as BPF. Dentre todas as características que definem a quitosana, as mais descritas na literatura são o peso molecular (PM), está associada ao tamanho das cadeias poliméricas, sendo responsável por alterações de viscosidade, solubilidade e o grau de desacetilação (GD), que será aqui estudado. A metodologia referenciada para a determinação do GD é a desenvolvida por Brugnerroto¹ et al. que apesar de ser bastante versátil e sensível, apresenta algumas dificuldades como a correta identificação das linhas de base utilizadas no cálculo das áreas integradas dos picos centrais característicos. A determinação do PM é realizada por meio da viscosimetria. Uma alternativa viável e eficiente para a determinação destes parâmetros é a utilização da espectroscopia NIR aliada a quimiometria.

Metodologia

Foram produzidas em laboratório 50 amostras de quitosana, variando seu GD na faixa de 69,80% a 91,90%. Estas amostras foram caracterizadas em termos de GD utilizando a metodologia de referência¹. Os espectros NIR destas amostras foram registradas utilizando um espectrômetro NIR, na faixa de 4.000 a 9.000 cm^{-1} , resolução de 8 cm^{-1} e 32 varreduras. Os espectros foram pre processados utilizando diversos pre tratamentos espectrais. Antes da construção do modelo PLS, foi verificada a presença de amostras anômalas, utilizando o gráfico de influência. As amostras foram divididas em conjuntos de calibração e validação, 100 e 50 amostras respectivamente, utilizando o algoritmo

SP-Xy. A capacidade preditiva dos modelos foi avaliada em termos de RMSEC, RMSEP e outras figuras de mérito.

Resultados e discussão

De acordo com o gráfico de influência versus resíduo estudantizado em X e em y, nenhuma amostra com comportamento anômalo foi detectada. O modelo que apresentou melhor resultado foi aquele construído com os coeficientes Jack Kinife (JK) dos dados pretreatados com a primeira derivada, com polinômio de 1ª ordem e suavização Savitzky Golay com janela de 5 pontos.

Tabela 1. Parâmetros para avaliação de performance dos modelos.

Pré-Tratamentos	VL	N	RMSE
		100	1.38
MSC	11	50	2.75
		100	1.57
MSC (JK)	8	50	1.99
1ª. Derivada janela 5 pontos,		100	1.32
polinômio 1ª. Ordem	5	50	2.54
1ª. Derivada janela 5 pontos,		100	1.54
polinômio 1ª. Ordem (JK)	4	50	1.84

Conclusões

A metodologia desenvolvida, baseada na espectroscopia NIR e calibração multivariada, mostrou ser uma alternativa viável aos métodos tradicionais para a quantificação do GD em quitosana, apresentando baixos valores de RMSEC, RMSECV e RMSEP, 1,32%; 2,54% e 1,85%, respectivamente. De forma geral os modelos construídos com os coeficientes JK utilizaram um menor número de variáveis latentes que aqueles construídos com todas variáveis espectrais.

Agradecimentos

Ao Laboratório de Avaliação e Desenvolvimento de Materiais, CERTBIO, UFCG.



Perfil Químico Qualitativo de Cocaínas Apreendidas no estado da Paraíba

Pricila de S. Araújo¹ (IC)*, Felipe G. Murga² (PQ), Eduardo A. Toledo² (PQ), Kátia M. Bichinho¹ (PQ)
*pricila.saj@gmail.com

¹Universidade Federal da Paraíba – João Pessoa/PB, ²Departamento de Polícia Federal – Setor Técnico-Científico/PB

Palavras-chave: cocaína, adulterantes, drogas, cromatografia, química forense.

Introdução

No Brasil, o comércio ilícito de cocaína tem crescido desde 2010, representando cerca de 7 % do total de apreensões na América do Sul¹. Diferentes substâncias, classificadas como adulterantes, têm sido adicionadas à cocaína, pois simulam e/ou potencializam o efeito da droga². Atualmente, esses adulterantes representam novos desafios em termos de legislação, fiscalização federal e de saúde pública, tornando-se necessário constantemente identificar os diferentes tipos de substâncias em uso para essa finalidade³.

Em 2009, a Polícia Federal do Brasil (PF) estruturou o projeto Perfil Químico de Drogas (PeQui), elaborado para fornecer informações de inteligência e resultados de química forense sobre a origem de drogas, principalmente a cocaína, além de adulterantes, diluentes e suas correlações com as apreensões, mediante análises químicas.

Portanto, o presente trabalho teve como objetivo identificar adulterantes em amostras de cocaína por cromatografia em fase gasosa acoplada à espectrometria de massa (GC-MS), visando contribuir com as estratégias de ação da PF no estado e em âmbito nacional.

Resultados e Discussão

Foram analisadas 37 amostras de cocaína apreendidas no estado da Paraíba entre janeiro de 2014 e julho de 2017, por GC-MS.

Os adulterantes identificados foram: fenacetina, cafeína, lidocaína, levamisol, tetracaína, acetaminofeno e teofilina.

Em todas as amostras, foi constatada a presença de adulterantes, sendo a fenacetina a mais comumente encontrada, correspondendo a 65 % do total, no período avaliado. O segundo adulterante mais comum foi a cafeína, encontrada em 43 % das amostras. Entre 2015 e 2016, nota-se a frequente presença do levamisol e da tetracaína como adulterantes. A lidocaína, o acetaminofeno e a

teofilina foram menos frequentes, variando de 3 a 16 % do total das amostras estudadas.

Uma comparação com os estados brasileiros, onde já existem estudos de perfil químico de amostras de cocaína apreendidas, evidenciou que a variedade de adulterantes identificados nas apreensões feitas no estado da Paraíba é maior que a dos estados fronteiriços. Resultado similar foi encontrado na comparação com estados onde o consumo da droga é mais elevado.

Conclusões

O trabalho, além de inédito no estado da Paraíba, produziu informações sobre os adulterantes encontrados nas amostras de cocaína apreendidas no período de 2014 a 2017, contribuindo para estruturar ações estratégicas da PF, visando à redução da criminalidade oriunda do comércio ilícito de drogas de abuso.

Além disso, trata-se de informações relevantes para os serviços de saúde pública e privada que se dedicam ao tratamento de dependentes químicos, alertando sobre o risco adicional ocasionado pela presença de adulterantes em pacientes suscetíveis à ação desses fármacos.

Agradecimentos

Polícia Federal – Superintendência Regional na Paraíba, LAQA, DQ/UFPB, CNPq e CAPES.

¹ UNITED NATIONS OFFICE ON DRUGS AND CRIME. World Drug Report. Disponível em: <https://www.unodc.org/doc/wdr2016/WORLD_DRUG_REPORT_2016_web.pdf>. Acesso em 08/04/2017.

² Floriani, G. Desenvolvimento e validação de método por CLAE para análise de cocaína, seus produtos de degradação e adulterantes. 2012, 81 pág. Dissertação de Mestrado em Ciências Farmacêuticas, Universidade Federal do Paraná.

³ Goulart, S.S.J. Otimização e Validação de Método Cromatográfico para Quantificação de Componentes Majoritários em Amostras de Cocaína. Dissertação de Mestrado, Universidade de Brasília, 2012.



Determinação de metilparabeno em adoçantes artificiais por voltametria de onda quadrada

Valdeíse L. Silva^{1*} (IC), Samantha D. Coiado¹ (IC), Maria S. R. Dantas¹ (PG), Mário C. U. Araújo¹ (PQ) e Kátia M. Bichinho¹ (PQ)

¹ Universidade Federal da Paraíba, Cidade Universitária, S/N – Joao Pessoa – PB – Brasil

*lemonsvals@gmail.com

Palavras-chave: *parabenos, voltametria e adoçantes.*

Introdução

Os parabenos são um grupo de compostos químicos derivados do ácido p-hidroxibenzoico, que têm sido amplamente utilizados como conservantes em diferentes produtos farmacêuticos, alimentos processados e cosméticos durante os últimos 100 anos. Promovem ação antimicrobiana e antifúngica de amplo espectro e foram inicialmente adicionados a produtos farmacêuticos, rapidamente expandindo para aplicações na indústria de alimentos e, mais recentemente, em produtos de cuidado e higiene pessoal, que incluem os cosméticos¹. Estudos apontam que os parabenos estão associados ao desenvolvimento de câncer de pele e de mama e atuam como interferentes endócrinos. O metilparabeno (MP) é o mais utilizado como aditivo alimentar em nível mundial. Um exemplo é o uso como conservante em adoçantes líquidos. Os principais edulcorantes artificiais são a sacarina sódica, ciclamato de sódio, aspartame e sucralose. Segundo a ANVISA, a concentração máxima permitida de parabenos em adoçantes líquidos é de 0,15 g/ 100 mL de produto.

Neste estudo, a determinação de MP em adoçantes artificiais foi feita por voltametria de onda quadrada, técnica escolhida devido ao baixo custo de aquisição e manutenção e alta sensibilidade analítica. As medidas voltamétricas foram realizadas em potenciostato/galvanostato modelo μ -Autolab, equipado com uma célula eletroquímica composta por eletrodos: diamante dopado com boro 800 ppm (trabalho), Ag/AgCl e fio de platina (referência e auxiliar), eletrólito suporte tampão fosfato 0,1 mol L⁻¹. A ativação da superfície do eletrodo de DDB foi feita em H₂SO₄ 0,5 mol L⁻¹ em potencial de -2 V por 30 s, seguida da polarização anódica em potencial de +2 V durante 60 s. Uma solução estoque 9,99 × 10⁻³ mol L⁻¹ de MP foi utilizada.

Resultados e Discussão

O estudo de pH evidenciou maior magnitude de sinal em pH 6, escolhido para as medidas quantitativas. Voltamogramas de onda quadrada revelaram um processo de oxidação irreversível do MP em 0,95 V, concordante com a literatura². Observou-se significativa adsorção do MP à superfície do eletrodo, por comparação das respostas analíticas de três sucessivas varreduras de potencial. Assim, foi necessário proceder a limpeza eletroquímica da superfície do eletrodo entre cada medida realizada. Limites de detecção e quantificação de 1,30 × 10⁻⁷ mol L⁻¹ e 4,32 × 10⁻⁷ mol L⁻¹ foram obtidos. O método foi aplicado para quantificar MP em três amostras de diferentes adoçantes adquiridas no comércio local, analisadas diretamente, requerendo apenas prévia diluição com água ultrapura. Foram encontradas concentrações de 0,0008 g/ 100 mL, 0,508 g/ 100 mL e 0,001 g/ 100 mL de MP, uma com valor máximo de 3,4 vezes acima do permitido na legislação vigente.

Conclusões

O método mostrou-se adequado para a aplicação proposta, sem a necessidade de procedimentos de preparo das amostras. Este estudo contribui para alertar a população que o uso de adoçantes artificiais pode comprometer a saúde humana tanto por conter edulcorantes quanto devido à presença de parabenos, inclusive com concentrações acima da permitida pela ANVISA.

Agradecimentos

CNPq, INCTAA, CAPES, UFPB, LAQA

¹ Goyal, S.; Amar, S. K.; Kushwaha, H. N.; Singh, J.; Srivastav, A. K.; Dubey, D.; Chopra, D.; Ray, R. S. *Global Journal of Multidisciplinary Studies*. **2014**, 4 77-86.

² Gil, E.S; Andrade C. H.; Barbosa, N. L.; Braga, R. C.; Serrano S. H. P. *J. Braz. Chem. Soc.* **2012** 23(3) 565-572.



ANÁLISE FÍSICO-QUÍMICA DA ÁGUA DE ABASTECIMENTO DA CIDADE DE AREIA - PB

Raul S. R. Araújo^{1*} (IC), Ewerton M. de Lima¹ (IC), Leandro dos S. Silva¹ (IC), Carlos V. dos Santos Júnior¹ (IC), Tereziana da S. Costa¹ (PG), Maria Betania H. do Santos¹ (PQ).
*raul.s.r.araujo@gmail.com

¹Departamento de Química e Física (DQF), Centro de Ciências Agrárias, Universidade Federal da Paraíba, Campus II, CEP 58397-000, Areia, PB, Brasil.

Palavras-Chave: Qualidade da Água, Potabilidade.

Introdução

A água é essencial para a manutenção da vida e bastante utilizada pelos seres humanos, por isso, é necessário que esta atenda aos padrões de potabilidade estabelecido pelo Ministério da Saúde na Portaria nº 2.914 de 12 de dezembro de 2011^[1,2]. A qualidade água de abastecimento está relacionada às condições ambientais a qual encontra-se exposta, sendo muitas vezes necessário que está passe por tratamento que envolva processos físicos, químicos e biológicos para torná-la potável para o consumo humano^[2]. Para assegurar a qualidade desta água, é de suma importância a realização de análises que identifique os agentes químicos, físicos e microbiológicos. Baseado no apresentado o objetivo da presente pesquisa foi analisar os parâmetros físico-químicos da água de abastecimento da cidade de Areia-PB. As análises foram realizadas no Laboratório de Química Analítica do Departamento de Química e Física (DQF), pertencente ao Centro de Ciências Agrárias (CCA) - Campus II, da Universidade Federal da Paraíba (UFPA). Os parâmetros físico-químicos determinados foram: turbidez, oxigênio total dissolvido, pH, temperatura, condutividade e teores de Ca²⁺, Na⁺ e K⁺, esses foram realizados manuseando respectivamente os seguintes instrumentos previamente calibrados: Turbidímetro digital Modelo DLT-WV DEL LAB, Medidor de oxigênio dissolvido Modelo DO 5519-LUTRON, pHmetro Modelo Luca-210-MS TECNOPON, Termômetro de mercúrio, Condutivímetro Luca-150 – LUCADEMA e Fotômetro de Chama Modelo 910M ANALYSER. Para determinação da alcalinidade, cloretos e dureza foram utilizados métodos clássicos de volumetria de titulação^[3].

Resultados e Discussão

Na Tabela 1 apresentam-se os valores obtidos nas análises realizadas na água de abastecimento da cidade de Areia – PB. Esses valores foram comparados com o estabelecido na Portaria nº 2914/2011 do Ministério da Saúde e na Resolução nº 357/2005 do CONAMA^[2,4]. Ao analisar a Tabela

1, nota-se que apenas o resultado obtido para a condutividade elétrica foi superior ao estabelecido na Portaria nº 2914/2011. Valores similares para este parâmetro foram encontrados por Nóbrega e colaboradores^[5] ao analisar a água de abastecimento da cidade de São Domingo – PB.

Tabela 1. Resultados das análises realizadas nas amostras de água do abastecimento público da cidade de Areia - PB.

MEDIDAS DIRETA		
PROPRIEDADES	Média ± DP	VMP
Na ⁺ (mg /L)	56,58 ± 4,50	200
K ⁺ (mg /L)	7,75 ± 0,50	-----
Ca ²⁺ (mg /L)	6,50 ± 1,00	-----
CONDUTIVIDADE (µs/cm)	368,00 ± 5,61	200
TURBIDEZ (UT)	0,59 ± 0,51	5
pH	7,74 ± 0,04	6,0 - 9,0
OXIGÊNIO DISSOLVIDO (%)	20,67 ± 0,28	-----
MEDIDAS INDIRETAS		
PROPRIEDADES	Média ± DP	VMP
CLORETOS (mg /L)	8,41 ± 1,62	250
DUREZA (mg /L)	42,00 ± 3,65	500
ALCALINIDADE (mg/L)	64,50 ± 2,52	-----

Fonte: Elaboração própria VMP - Valor máximo permitido

Conclusões

A partir dos resultados obtidos pode-se concluir que os parâmetros físico-químicos da água de abastecimento da cidade de Areia-PB encontram-se dentro dos padrões estabelecidos na Portaria nº 2914/2011 do Ministério da Saúde e pela Resolução nº 357/2005 do CONAMA, com exceção da condutividade elétrica.

^[1] LENZI, E. et al. *Introdução à Química da Água – Ciência, vida e sobrevivência*. 2009.

^[2] BRASIL, Ministério da Saúde. *Portaria nº 2.914*. 2011.

^[3] FUNASA - Fundação Nacional de Saúde. *Manual Prático de Análise de Água*. 2004, 146.

^[4] CONSELHO NACIONAL DO MEIO AMBIENTE – CONAMA. *Resolução nº 357*. 2005.

^[5] NÓBREGA, M. D. A. C. *INTESA*. 2015, 10.



Determinação de nitrato e nitrito em águas salinas por espectrofotometria usando zinco em pó como agente redutor

Pedro A. Souza Neto (IC)*, Ilda A.S. Toscano (PQ)

Universidade Federal da Paraíba
Departamento de Química-CCEN
João Pessoa-Pb

Pedroalves.10@hotmail.com

Palavras Chave: nitrato, redução com zinco, águas salinas

Dentre os parâmetros de potabilidade, o nitrogênio, nas formas de nitrato, nitrito e amônia, tem se tornado objeto de interesse devido ao possível efeito entre o consumo de águas com níveis elevados de nitrato e a incidência de diversos tipos de câncer. Outro problema causado por excesso de nitrogênio e fósforo nas águas é a eutrofização, que leva à proliferação de algas. Em cidades litorâneas, é frequente que os esgotos sanitários tenham os oceanos e estuários como destino final, contribuindo para a entrada de nitrogênio. Assim, é possível associar a presença de nitrato e nitrito com as descargas de esgotos¹. O presente trabalho buscou aplicar um procedimento em batelada utilizando zinco em pó, como agente redutor em substituição à tradicional coluna de cádmio, para nitrato em águas salinas naturais, bem como avaliar a presença de íons cloretos, presentes neste tipo de amostra.

Resultados e Discussão

Após alguns ensaios o método foi utilizado com ajuste de pH em 11, tempo e modo de agitação de 5 minutos em mesa orbital e a zinco em pó de menor granulometria². Os dados das curvas analíticas de nitrato, na ausência de NaCl (PNO3-Zn) e na presença (PNO3-Zn-CL) mostram coeficientes de correlação linear, R^2 0,9814 e R^2 0,9610, respectivamente (Fig.1). Esta perda de linearidade pode ser devida a presença de cloretos, mas não chega a comprometer a quantificação do analito. O processo de conversão, de nitrato a nitrito com zinco em pó, variou na faixa de 127 a 79% para PNO3-Zn, e 160% em concentração de 0,1 mg.L⁻¹ a 66% para PNO3-Zn-CL em 0,6 mg.L⁻¹, mostrando ligeira tendência a decrescer quando a concentração do analito aumenta. A diminuição da conversão com o aumento da concentração de nitrato pode ser devido à saturação da superfície do zinco, que leva à perda de eficiência ou a necessidade de aumentar a massa do redutor.

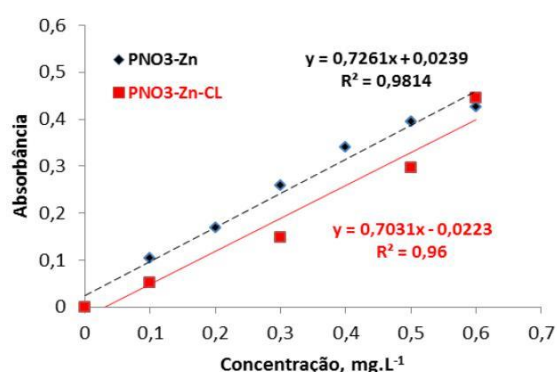


Figura 1. Curvas analíticas com os padrões de nitrato após a redução com zinco em pó e presença/ausência de NaCl, em 540nm.

Tabela 1. Eficiência na conversão de nitrato a nitrito

Concentração (mg.L ⁻¹)	% de conversão	
	PNO3-Zn	PNO3-Zn-CL
0,1	127	160
0,3	99	80
0,6	79	66

Conclusões

A quantificação de nitrato em águas salinas, por redução com zinco em pó, foi aplicado com sucesso em nível de traços, mesmo na presença de cloretos, em concentrações comuns neste tipo de matriz. O método é simples, permite a análise de várias amostras por batelada, menos oneroso por utilizar produtos de baixo custo e de fácil aquisição, como o zinco, e menos tóxico, com a substituição do cádmio.

Agradecimentos

CNPq e UFPA

¹ Manahan, S. E. Química Ambiental. 9ª Ed. Editora Bookman. 2013.

² Merino, L. Development and Validation of a Method for Determination of Residual Nitrite/Nitrate in Foodstuffs and Water After Zinc Reduction. *Food Anal. Methods*, 2009, 2, 220.



Emprego do Índice de Qualidade das Águas para o diagnóstico ambiental da bacia do Rio Marés

João de Jesus Maurício¹ (IC)*, Cláudia de Oliveira Cunha¹ (PQ).

¹ Universidade Federal da Paraíba, Campus I, João Pessoa, Paraíba, e-mail: janmall_jjm@hotmail.com.

Palavras Chave: Análise Ambiental, IQA, Rio Marés.

Introdução

O rio Marés, localizado no litoral sul do estado da Paraíba, é uma das fontes de água para o abastecimento da população de João Pessoa. Faz-se necessário o monitoramento desse manancial, devido ao crescimento da urbanização em torno do rio e à agricultura presente em suas proximidades [1]. O índice de qualidade das águas (IQA) foi desenvolvido a partir de pesquisas com especialistas da área ambiental que definiram um conjunto de nove parâmetros considerados representativos para a caracterização da qualidade das águas [2]. O presente trabalho tem como objetivo determinar e avaliar a qualidade da bacia hidrográfica do rio Marés utilizando o IQA.

Metodologia

- 1) Seleção dos pontos de coleta (Figura 1a).
- 2) Amostragem (Figura 1b).
- 3) Análises físico-químicas.

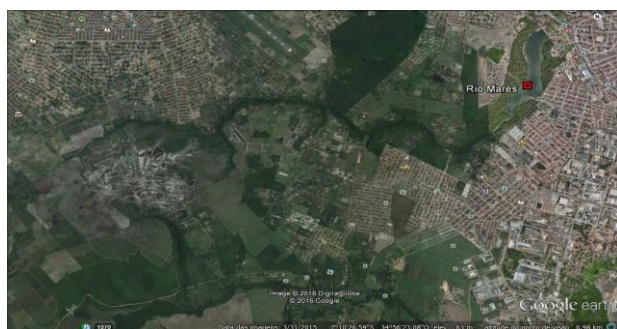


Figura 1 – (a) Seleção dos pontos de coleta do Rio Marés; (b) amostragem.

Resultados e Discussão

A Tabela 1 apresenta os resultados obtidos das análises físico-químicas de coletas feitas nos meses de março (1), abril (2) e maio (3).

Tabela 1. Resultados das análises físico-químicas.

	1	2	3
Parâmetros			
OD	11,1	15,3	12,0
pH	6,6	6,2	6,4
DBO	1,4	3,2	1,2
Temperatura (°C)	32,4	30,2	31,5
Nitrogênio Total (mg/L)	0,20	0,19	0,24
Fósforo Total (mg/L)	0,37	0,45	0,62
Turbidez (UNT)	21	23	25
Sólidos Totais (mg/L)	90	132	117

O IQA, apresentou um valor dentro da faixa de 80-100, sendo considerado segundo a CETESB uma água de ótima qualidade.

Conclusões

Entre as coletas houve um largo período de chuva, e foi notado que houve uma diminuição da concentração dos parâmetros como o nitrogênio e o fósforo total. Como também, um aumento na turbidez e, conseqüentemente, nos sólidos totais. Além da variação considerável do pH, que ficou com caráter mais ácido do que o meio natural.

Agradecimentos

Ao Laboratório em Estudos de Química Ambiental (LEQA), ao Programa de Iniciação Científica e a professora orientadora desde trabalho, Cláudia de Oliveira Cunha.

¹ MELO, J.R.C. Arcabouço legal e institucional e a situação de proteção ambiental dos mananciais: O caso do rio Marés na Paraíba. João Pessoa, 2013.

² BRASIL, 2013. CETESB. Índice de Qualidade das Águas (IQA). Séries de Documentos – Qualidade das águas interiores no estado de São Paulo. Disponível em <http://aguasinteriores.cetesb.sp.gov.br/wp-content/uploads/sites/32/2013/11/02.pdf>. Acesso em 31 de Agosto de 2017.



Atividade antioxidante da espécie vegetal *Waltheria viscosissima*

Camila Macaúbas da Silva^{1*} (IC), Gabryella F. Monteiro² (IC), Maysa Dayanne G. Félix³ (IC), Maria Denise L. Ferreira⁴ (PG), Milen M. M. S. Fernandes⁵ (PG), Maria de Fatima V. Souza⁶ (PQ), Yanna Carolina F. Teles⁷ (PQ).

*¹camilamacaubas@hotmail.com

¹Departamento de Química e Física, Centro de Ciências Agrárias, Universidade Federal da Paraíba, Campus II, CEP: 58397-000, Areia, Paraíba, Brasil.

Palavras Chave: *Waltheria*, *Malvaceae*, DPPH

Introdução

Muitas reações que ocorrem no organismo, levam a formação de radicais livres, moléculas orgânicas ou inorgânicas que possuem átomos que contêm um ou mais elétrons não pareados, como o superóxido ($O_2^{\cdot-}$) e hidroperoxila (HO_2^{\cdot}). Por serem altamente instáveis e oxidantes, os radicais livres oxidam biomoléculas e contribuem para o desenvolvimento de doenças como inflamações crônicas, Alzheimer e câncer¹.

Estudos indicam que a ingestão de produtos antioxidantes, está relacionada com a redução do risco dessas doenças², pois são substâncias capazes de retardar ou inibir a oxidação de substratos, como lipídeos de membrana, proteínas e o DNA³.

A *Waltheria viscosissima* A. St. Hil. (Malvaceae), conhecida como "malva viscosa", é rica em óleos essenciais, flavonoides e alcalóides e utilizada na medicina popular como, expectorante, antitussígeno e emoliente⁴.

Diante da importância biológica dos produtos antioxidantes e da utilização popular da espécie, o objetivo do trabalho foi avaliar a atividade antioxidante da *Waltheria viscosissima*.

Para avaliar a atividade antioxidante do extrato etanólico das partes aéreas da espécie, foi utilizado o método sequestrador de radicais livres DPPH (2,2-difenil-1-picrilhidrazila), descrita por Maciel et al, 2016.

Resultados e Discussão

A curva de calibração do DPPH nas concentrações de 60; 50; 30; 15 e 7,5µM, gerou a equação da reta I: $Y = 0,008418.X - 0,02017$, com coeficiente de linearidade satisfatório de 0,9997. A absorbância que corresponde à redução de 50% (Abs_{50}) na concentração de DPPH foi calculada, obtendo o valor de 0,2435.

A curva de calibração do extrato etanólico nas concentrações de 40, 20 e 10µg/mL, gerou a equação da reta II: $Y = -0,001921.X + 0,4705$, com coeficiente de linearidade satisfatório de 0,9990.

Para o extrato etanólico das partes aéreas de *W. viscosissima* a EC_{50} (concentração de extrato que reduz em 50% a contração de DPPH) encontrada foi de 118,1 µg/mL.

Resultados obtidos por Vieira et al., 2011, mostram os valores para frutas altamente antioxidantes, como a polpa de acerola com valor de EC_{50} de 24,42 µg/mL para o extrato aquoso; a goiaba com valor de EC_{50} de 19,69 µg/mL para o extrato hidroalcoólico; e o caju com valor de EC_{50} de 154,95 µg/mL para o extrato aquoso. Podemos portanto observar que o extrato etanólico de *Waltheria viscosissima*, possui um bom potencial antioxidante.

Conclusões

Os resultados obtidos indicaram que o extrato etanólico da espécie *W. viscosissima* possui boa atividade antioxidante. A capacidade antioxidante de extratos vegetais está relacionada principalmente à presença de substâncias fenólicas, como flavonoides, já identificados na espécie em estudo.

Agradecimentos

UFPB/CCA, Departamento de Química e Física.

¹ TELES, Y. C. F., et al. O papel do estresse oxidativo na síndrome metabólica. *J Health Sci Inst.* v. 33, n.1, p. 89-93, 2015.

² CAI, Y., et al. Antioxidant activity and phenolic compounds of 112 traditional Chinese medicinal plants associated with anticancer. *Life Sci.* v.74, p. 2157-2184, 2004.

³ MORAIS, S. M., et al. Ação antioxidante de chás e condimentos de grande consumo no Brasil. *Revista Brasileira de Farmacognosia.* v. 19, n. 1B, p. 315-320, 2009.

⁴ ROLIM, Y. M. Alcalóides e glicosídeo flavonóidico de *Waltheria viscosissima* A. St. Hil - Malvaceae. Dissertação do Programa de Pós-Graduação em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos. João Pessoa. 2015.

⁵ MACIEL, J.K.S., et al. New alkalamide and antioxidant activity of *Pilosocereus gounellei* A. Weber ex K. Schum. *Bly. exRowl.* (Cactaceae). *Molecules.* v. 21, p. 0011-0023, 2016.

⁶ VIEIRA, L. M., et al. Fenólicos totais e capacidade antioxidante in vitro de polpas de fruto tropicais. *Rev. Bras. Frutic. Jaboticabal.* v.33, n.3, p. 888-897, 2011.



Síntese, caracterização e potencialidade antimicrobiana de α -aminonitrilas contra cepas de *Candida*

André S. S. G. Baptista¹ (IC)*, Raquel F. Vilela¹ (PG), Helivaldo D. S. Souza¹ (PG), Daniele F. Silva¹ (PG), Givanildo L. Fernandes¹ (IC), Bruno F. Lira¹ (PQ), Edeltrudes O. Lima¹ (PQ), Petrônio F. A. Filho¹ (PQ). *E-mail: andssgb@gmail.com.

¹Universidade Federal da Paraíba, 58051-970, João Pessoa – PB, Brasil.

Palavras Chave: α -aminonitrilas, *Candida*.

Introdução

As α -aminonitrilas são compostos intermediários versáteis na síntese orgânica, principalmente na preparação de moléculas biologicamente importantes, como os aminoácidos e heterocíclicos¹. A reação de Strecker é o método de obtenção das α -aminonitrilas, onde usa-se o aldeído, solução de amônia e o ácido cianídrico. As α -aminonitrilas apresentam atividades biológicas como herbicidas, antioxidantes e moduladores do bioprocessamento de carboidratos². O presente trabalho apresenta a obtenção de α -aminonitrilas e suas avaliações antimicrobianas frente a cepas de *Candida*.

Resultados e Discussão

As α -aminonitrilas (**2a-d**) foram preparadas pela reação de Strecker, usando aldeídos aromáticos p-substituídos (**1a-d**), KCN e anilina em MeOH/AcOH. A rota sintética pode ser vista na figura 1.

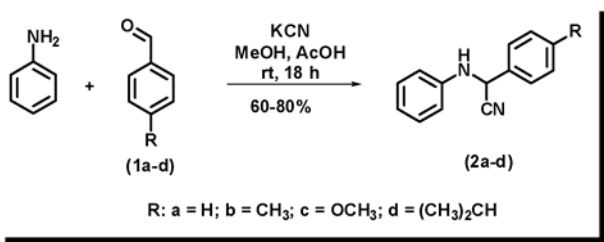


Figura 1. Síntese das α -aminonitrilas.

Os produtos obtidos foram todos purificados pela técnica de recristalização e foram obtidos com rendimentos de 60 a 80%. As estruturas foram confirmadas pelas técnicas espectroscópicas de infravermelho e RMN de ¹H. Os espectros de IV mostram absorções em 2239-2227 cm⁻¹ referentes ao grupo CN, em 3396-3325 cm⁻¹, correspondentes ao grupo NH, em 1600-1594 cm⁻¹ e 1460-1408 cm⁻¹, devidas à deformação axial de C=C de anéis aromáticos e em 3035-3010 cm⁻¹, relativas ao estiramento da ligação CH de anéis aromáticos. O

composto **2c** também apresenta banda de absorção de estiramento da ligação C-O em 1238 cm⁻¹. Nos espectros de RMN ¹H foi observado um singlete para o H metínico em δ 5.34-5.49 ppm; para os compostos **2b** e **2c**, singletos em δ 2.51 e 3.82 ppm, referentes aos H metílicos de CH₃ e OCH₃, respectivamente. Os compostos **2a-d** foram testados para a atividade microbiana nas seguintes cepas de *Candida*: *C. albicans* ATCC-76485, *C. albicans* LM-5, *C. tropicalis* ATCC-13803 e *C. tropicalis* LM-96. Os compostos **2a-d** apresentaram inibição com CIM entre 256-1024 μ g/mL frente às cepas de *C. albicans* ATCC-76485 e *C. albicans* LM-5. Os compostos **2a** e **2b** foram os únicos que revelaram inibição contra a *C. tropicalis* ATCC-13803 e com uma CIM de 256 e 1024 μ g/mL, respectivamente. Já para a cepa de *C. tropicalis* LM-96, os compostos **2a**, **2b** e **2d** apresentaram inibição com uma CIM entre 256-512 μ g/mL.

Conclusões

A rota sintética utilizada para a síntese das α -aminonitrilas mostrou-se ser simples e eficaz, apresentando bons rendimentos. Na avaliação antimicrobiana contra as cepas de *Candida*, os compostos investigados apresentaram inibição de CIM de 256-1024 μ g/mL, que pode ser considerada como atividade moderada a ótima, conforme os critérios adotados por Sartoratto³.

Agradecimentos

Ao CNPq, Capes e UFPB.

¹ Shafran, Y. M.; Bakulev, V. A.; Mokrushin, V. S. *R. Che. Rev.* **1989**, 2, 58.

² Rogerio, K. R.; Vitória, F.; Kümmerle, A. E.; Graebin, C.S. *Rev. Virt. Quim.* **2016**, 8 (6), 1934-1962.

³ Sartoratto, A.; Machado, A. L. M.; Delarmelina, C.; Figueira, G. M.; Duarte, M. C. T.; Rehder, V. L. G. *Brazilian Journal of Microbiology*, **2004**, v. 35, p. 275-280.



Avaliação antibacteriana dos α -aminoácidos

Isabela L. de Anesio¹ (IC), Helivaldo D. S. Souza¹ (PG), Daniele de Figueredo Silva¹ (PG), Priscila S. V. Lima¹ (PG), Alany de Oliveira Lima¹ (IC), Givanildo L. Fernandes¹ (IC), Bruno F. Lira¹ (PQ), Edeltrudes O. Lima¹ (PQ), Petronio F. A. Filho¹ (PQ)*. Email: athayde-filho@quimica.ufpb.br.

¹Universidade Federal da Paraíba, 58051-970, João Pessoa – PB, Brasil.

Palavras Chave: Aminoácidos, atividade antibacteriana, Síntese.

Introdução

Estruturalmente, os aminoácidos são compostos que contém um grupo amino e um grupo ácido ligado ao carbono alfa, onde também está ligado um grupo *R* que diferencia cada um deles. Quando unidos, formam as proteínas que constituem os componentes mais importantes dos seres humanos como músculos, células e outros tecidos¹. Essa classe de compostos vem se mostrando perscrutadora em diversas pesquisas na área de óptica não-linear, e também na síntese de uma série de derivados que tem como objetivo desenvolver medicamentos mais eficazes no combate de diversas doenças como a Depressão e o Parkinson, por demonstrarem um aumento na atividade biológica quando utilizados como adjuvantes².

Resultados e Discussão

Os α -aminoácidos (**3a-d**) foram obtidos pela síntese de Strecker³, essa reação envolve os aldeídos aromáticos *p*-substituídos (**1a-d**) com cianeto de potássio e cloridrato de metilamônio em quantidades equimolares. Essa reação ocorre a formação de um intermediário, α -aminonitrila (**2a-d**), que em seguida sofre uma hidrólise com uma solução de HCl 6M formando os α -aminoácidos. A rota sintética pode ser vista na figura 1.

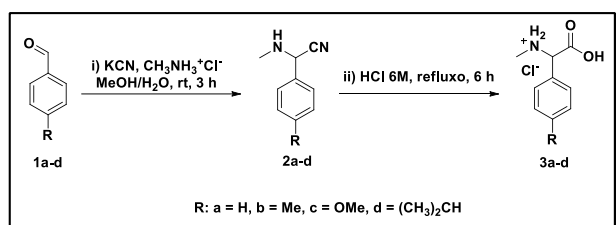


Figura 1. Síntese dos α -aminoácidos

Os compostos sintetizados foram recristalizados em EtOH/H₂O e apresentaram rendimentos entre 61-70% e foram caracterizados por técnicas espectroscópicas de IV, RMN ¹H e ¹³C. Nos espectros de infravermelho mostraram absorções em 3250-3188 cm⁻¹ estiramentos referentes do grupo NH. A banda de absorção correspondente ao

estiramento do grupo carbonila ocorreu na faixa de 1740-1735 cm⁻¹. Absorções em 1585-1425 correspondente a deformação axial de C=C de anéis aromáticos. Nos espectros de RMN ¹H dos α -aminoácidos foram observados o singlete para o próton metínico em δ 5.02-4.96 ppm. Para o composto **3b** e **3c** foram observados singletos em δ 2.37 e 3.75, referentes aos prótons metílicos de CH₃ e OCH₃, respectivamente. Nos espectros de ¹³C observou-se em δ 170.84-169.26 ppm correspondente ao sinal característico de carbonila. Os compostos **3a-d** foram testados para a atividade antibacteriana nas seguintes cepas: *Staphylococcus aureus* ATCC-25923, *Staphylococcus aureus* M-117, *Pseudomonas aeruginosa* ATCC-9027 e *Pseudomonas aeruginosa* P-03. Os compostos **3a**, **3b** e **3d** não apresentaram inibição frentes a bactérias. Já o composto **3c** apresentou inibição frente a três (75%) das quatro cepas (*Staphylococcus aureus* M-117, *Pseudomonas aeruginosa* ATCC-9027 e *Pseudomonas aeruginosa* P-03) com uma CIM de 512 μ g/mL.

Conclusões

A rota sintética utilizada para a síntese dos compostos α -aminoácidos mostrou-se ser simples, eficaz e apresentando bons rendimentos. Na avaliação antibacteriana, dos quatro compostos investigados, apenas o composto **3c** apresentou inibição positiva com CIM de 512 μ g/mL com 75% de inibição nas quatro cepas investigadas e pode ser considerada como ótima atividade conforme os critérios adotados por Sartoratto⁴.

Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq e CAPES pelo apoio financeiro e ao LPBS pela realização do trabalho.

¹ Hughes, A. B. *Amino Acids, Peptides and Proteins in Organic Chemist.* 2009, ISBN: 978-3-527-32096-7

² Kobayashi, K. S., et. Al. *National Institutes of Health.* 2011. 7(3): 180-197.

³ R. L. Shriner, S. P. Rowland and C. H. Tilford, *Organic Syntheses*, 1955, v. 3, 84.

⁴ Sartoratto, A.; Machado, A. L. M.; Delarmelina, C.; Figueira, G. M.; Duarte, M. C. T.; Rehder, V. L. G. *Brazilian Journal of Microbiology*, 2004, v. 35, p. 275-280.



Utilização de aminas aromáticas como prevenção à oxidação do biodiesel metílico de algodão

Fábio Batista Lima Filho^{1*}(IC), Gabrielly dos Santos Maciel² (PG), Neide Queiroz³ (PQ), Antônia Lucia de Souza⁴ (PQ)

^{1,2,3,4} Universidade Federal da Paraíba

*fabioblif@hotmail.com

Palavras Chave: *biodiesel, aminas, oxidativa.*

Introdução

A produção de biodiesel a partir do óleo de algodão apresenta um problema envolvendo a estabilidade oxidativa do produto. A seguinte pesquisa, diante do exposto, teve o intuito de solucionar ou amenizar o problema com o uso de antioxidantes fenólicos e nitrogenados, puros ou em misturas binárias. Para a realização dessa proteção ao biodiesel foi utilizado as técnicas P-DSC (calorimetria exploratória diferencial pressurizada) e PetroOxy.

Resultados e Discussão

Com exceção do teor de água, todas as propriedades físico-químicas se apresentaram em conformidade de cada norma regimentada. Os que mais interferem no processo de degradação oxidativa são os índices de acidez e o teor de água, pois o aumento destes resulta em um aumento de produtos secundários da oxidação.

Os resultados nos forneceram que todos os antioxidantes utilizados apresentaram eficácia no controle da estabilidade oxidativa do BMA, mas um acréscimo significativo no valor de HPOIT não foi apresentado com o aumento da concentração do antioxidante.

Como observado anteriormente, o BMA foi protegido por todos os antioxidantes utilizados nesta pesquisa, com fator de proteção (FP) variando de 1,1 a 2,3. Os compostos fenólicos BHT e BHA apresentaram maior eficiência, entretanto as aminas DAT e DAB também apresentaram um ótimo desempenho antioxidativo.¹

Assim como o antioxidante ativo puro, as misturas binárias foram puras. Foi alcançado por todas as amostras HPOIT superior ao BMA puro.

Todas as misturas apresentaram valor de PI superior ao valor do BMA puro, logo, houve efeito protetor em todos.

As amostras analisadas pela técnica P-DSC também foram analisadas por PetroOXY.

Conclusões

Todas as amostras, seguindo as metodologias empregadas, obtiveram resultados maiores que o BMA puro, demonstrando que os antioxidantes fenólicos e aminados apresentam um potencial antioxidante eficiente para o biodiesel metílico de algodão.

Agradecimentos

À CNPq, UFPA, Lacom – Núcleo de Pesquisa e Extensão de Combustíveis e de Materiais.

¹ Damasceno, S. S.; Santos, N. A.; Santos, I. M. G.; Souza, A. L.; Souza, A.G. e Queiroz, N. *Caffeic and ferulic acids: an investigation of the effect of antioxidants on the stability of soybean biodiesel during storage* 2013.



Síntese, Caracterização e Avaliação antifúngica de δ -cloroésteres.

Francinara S. Alves¹ (IC) *, Rafael F. Oliveira¹ (PG), Min-Fu N. Huang¹ (PG), Helivaldo D. S. Souza¹ (PG), Gilvanildo L. Fernandes¹ (IC), Genilson S. Pereira¹ (IC), Daniele F. Silva¹ (PG), Edeltrudes O. Lima¹ (PQ), Isabela L. Anesio¹ (IC), Petrônio F. de Athayde-Filho¹ (PQ). Email: francinaraufpb@gmail.com

¹Universidade Federal da Paraíba, 58051-970, João Pessoa – PB, Brasil.

Palavras Chave: Sínteses, δ -cloroésteres, atividade antimicrobiana.

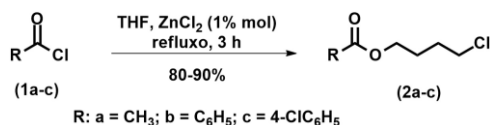
Introdução

A preparação de δ -cloroésteres é importante para a obtenção de moléculas na síntese de produtos naturais onde é necessária comprimentos de cadeia carbônica facilmente ajustáveis. Estes δ -cloroésteres também são empregados como intermediários na síntese de produtos farmacêuticos. Sabe-se há algum tempo que éteres cíclicos sofre clivagem na presença de ácidos de Lewis tais como halogenetos de $ZnCl_2$, ferro¹ e iodo². O uso de zinco é vantajosamente, porque é abundante, barata e pouco tóxica. No entanto, mesmo que a abertura do anel de éteres cíclicos catalisados por zinco tenham sido bem relatadas, até o momento não há um consenso sobre o mecanismo de síntese desses δ -cloroésteres. A síntese tem como base a abertura do anel nucleofílico do éter. A abertura dos ésteres cíclicos são catalizadas com ácidos de Lewis com cloretos de ácido como nucleófilos e tem a vantagem de fornecer uma variedade de cloroésteres com comprimentos de cadeia variados, já que um grande número de éteres estão comercialmente disponíveis³.

Resultados e Discussão

Os δ -cloroésteres foram obtidos a partir da reação entre os cloretos de ácidos em THF catalisada por um ácido de Lewis ($ZnCl_2$) (Figura 1). Os compostos foram obtidos com rendimento de 80-90% e foram caracterizados com métodos espectroscópicos de Infravermelho e RMN ¹H.

Figura 1. Síntese dos δ -cloroésteres.



No espectro de infravermelho a banda de absorção correspondente ao estiramento do grupo carbonila de éster ocorreu na faixa de 1720 cm^{-1} .

Já nos espectros de RMN de ¹H das substâncias em estudo revelaram sinais característicos: um multipletos para 4 hidrogênios na região de alifáticos em 1.85-2.00 ppm, outro mutipletos para 2 hidrogênios em 3.30-3.82 ppm e outro multipletos para 2 hidrogênios na região de 3.90-4.40 ppm. Os compostos foram submetidos aos ensaios biológicos para avaliação da atividade antimicrobiana em Fungos filamentosos nas cepas de: *Aspergillus flavus* LM-247, *Aspergillus niger* LM-115, *Penicillium citrinum* LM-02, *Penicillium citrinum* LM-161. A concentração inibitória mínima (CIM) para os compostos foram de 1024 $\mu\text{g/mL}$ para todas as cepas de fungos filamentosos.

Conclusões

A rota sintética dos δ -cloroésteres mostrou ser simples, eficaz e apresentando bons rendimentos. Os resultados da atividade biológica frente às cepas de fungos podem ser considerados como de moderada atividade (1024 $\mu\text{g/mL}$) conforme os critérios adotados por Sartoratto⁴.

Agradecimentos

Ao CNPQ e CAPES pelo apoio financeiro.

¹Enthaler, S. *European Journal of Lipid Science and Technology*, **2013**, 115, 239.

²Pasha, M. A.; Manjula, K. *Synthetic Communications*, **2007**, 37, 932.

³Enthaler, S.; Weidauer, M. *Catalysis Letters*, **2012**, 142, 175.

⁴Sartoratto, A. et al. *Brazilian Journal of Microbiology*, **2004**, 35, 275.



Degradação de Poluentes Orgânicos Persistentes de Águas e Efluentes utilizando Processos de Oxidação Avançada

Juliana Teófilo dos Santos Pereira¹ (IC)*, Rênio Felix de Sena² (PQ). julianatsp@hotmail.com

Departamento de Engenharia Química, Campus João Pessoa UFPB¹, Departamento de Engenharia Química, Campus João Pessoa UFPB².

Palavras Chave: Processos de Oxidação Avançada, Volcane, Foto-Fenton.

Introdução

A poluição do meio ambiente por efluentes industriais tem aumentado nas últimas décadas, tornando-se um grave problema social e ambiental^[1]. Nesse modo, se destaca a contaminação de águas por compostos orgânicos dentre eles, os pesticidas.

No presente trabalho, estudou-se a viabilidade dos POAs foto-Fenton e sistema H₂O₂/UV bem como a utilização de irradiação UV-C sobre amostras de água contaminada com o Volcane afim que se tenha uma maior degradação do herbicida.

Para a realização dos ensaios foi preparada uma solução de 50mg L⁻¹ para realização dos testes em meio aquoso. os testes foram realizados no foto reator UV utilizando o comprimento de onda 191nm, onde analisou-se a taxa de degradação do volcane na presença de UV-C, variando as concentrações de H₂O₂. Para (1:1/2, 1:1 e 1:2) respectivamente.

Para o processo foto-Fenton, variou-se a quantidade do agente oxidante e do catalizador, respectivamente H₂O₂ e Fe²⁺. Tendo no teste [E], [F] e [G], as proporções de [H₂O₂] = 50mg.L⁻¹ com [Fe²⁺] = 10mg.L⁻¹, [H₂O₂] = 100mg.L⁻¹ com [Fe²⁺] = 20mg.L⁻¹ e [H₂O₂] = 20mg.L⁻¹ com [Fe²⁺] = 5mg.L⁻¹, respectivamente.

Todos os experimentos foram ajustados para pH=3, tendo como tempo de coleta: 0, 4, 8, 10, 15, 30, 45, 60, 75, 90, 105, 120, 150, 180, 210 e 240 minutos.

Resultados e Discussão

Os resultados na degradação do volcane para os processos de H₂O₂/Uv e foto-Fenton são apresentados na Fig. 1 e Fig. 2.

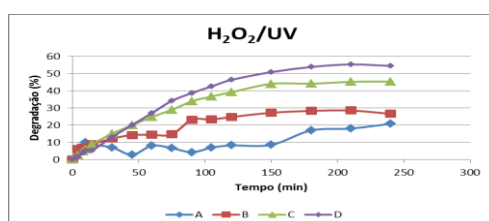


Figura 1. Gráfico da degradação do Volcane mediante o processo de oxidação avançada H₂O₂/UV

Percebe-se que após 120 min de ensaio, os experimentos [C] e [D] apresentaram concentrações reduzidas dos compostos, com 39,16 % e 46,34%.

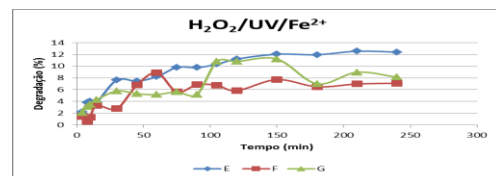


Figura 2. Gráfico da degradação do Volcane mediante o processo foto-Fenton

Os resultados para os ensaios do foto-Fento não se demonstraram satisfatório com quando relacionados com os obtidos no processo H₂O₂/UV, pois obteve degradação máxima de apenas 12,56% .

Conclusões

O processo H₂O₂/UV se mostrou mais eficiente do que o foto-Fenton, pois há fotólise e pode ser considerado relevante para o processo de remoção do herbicida volcane, mesmo que em taxas menos acentuadas;

Os ensaios oxidativos mostram reduções significativas para alguns compostos, especialmente no sistema H₂O₂/UV na proporção 1:2 (Volcane: H₂O₂) foi capaz de degradar mais da metade do herbicida, chegando a degradação máxima de 55,35%, após 210 min;

Agradecimentos

Agradecemos ao LCA pelo o apoio e espaço cedido na pesquisa e ao CNPQ pelo apoio financeiro.

¹ BRITO, Núbia Natália; SILVA, Victor Borges Marinho. Processo oxidativo avançado e sua aplicação ambiental. *REEC-Revista Eletrônica de Engenharia Civil*, v. 3, n. 1, 2012.

² FREIRE, R. S.; PELEGRINI, R.; KUBOTA, L. T.; DURÁN, N.; PERALTA-ZAMORA, P. Novas técnicas para o tratamento de resíduos industriais contendo espécies organocloradas. *Química Nova*, v.23, p.504-511, 2000^a



Síntese, caracterização e comprovação estrutural de derivados 2-cianoacetamida.

Jamire Muriel da Silva¹(PG)*; Gleyton Leonel S. Sousa¹(PG); Willian Charles da Silva Moura¹(PG); Miguel Ângelo S. P. Segundo¹(PG); Lucas Linhares de Lócio¹(IC); Edvania Emannelle Pinheiro Santos¹(IC); Ricardo Olimpio de Moura¹(PQ).

¹Universidade Estadual da Paraíba. Campina Grande-PB, Brasil. *jamiremuriel@hotmail.com.

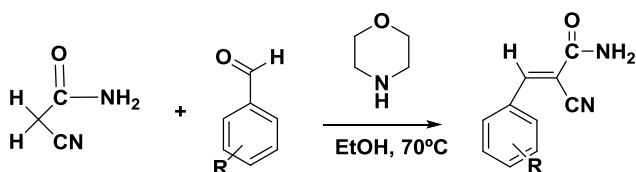
Palavras Chave: Acrilamidas substituídas. Condensação. Características físico-químicas.

Introdução

A recente preocupação com o meio ambiente está aumentando o interesse no desenvolvimento de processos limpos e econômicos para a produção de produtos químicos finos. Neste contexto, a utilização da reação de condensação de Knoevenagel, a qual pertence à classe geral das condensações do tipo aldólicas catalisadas por bases, torna-se vantajosa, pois é de fácil execução e de baixo custo. Diante disto, objetivou-se a síntese, caracterização e comprovação estrutural de novos derivados da cianoacetamida.

Resultados e Discussão

Esquema 1. Rota sintética da série EE.



R:2,6-Cl (EE01)	R:4-Cl (EE03)	R:4-CH3 (EE05)
R:2,3-Cl (EE02)	R:2,4-Cl (EE04)	R:4-OCH3 (EE06)

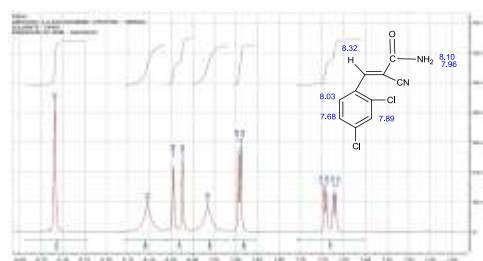
Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela 1. Características físico-químicas dos derivados sintetizados.

Comp.	Rend (%)	Rf	F.F (°C)	FM	Log P
EE01	68,39	0,87 (H:A/6:4)	190-193	C ₁₀ H ₆ Cl ₂ N ₂ O	2,29
EE02	74,81	0,85 (H:A/8:2)	227-230	C ₁₀ H ₆ Cl ₂ N ₂ O	2,29
EE03	26,87	0,92 (H:A/6:4)	164-166	C ₁₀ H ₇ ClN ₂ O	1,74
EE04	62,17	0,86 (H:A/6:4)	210-213	C ₁₀ H ₆ Cl ₂ N ₂ O	2,29
EE05	28,89	0,96 (H:A/6:4)	168-170	C ₁₁ H ₁₀ N ₂ O	2,22
EE06	78,50	0,65 (H:A/6:4)	235-237	C ₁₁ H ₁₀ N ₂ O ₂	1,61

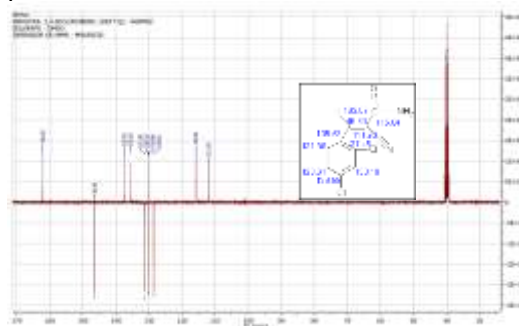
Legenda: Rend (%): Rendimento; Rf: Fator de Retenção; FM: Fórmula Molecular; PM: Peso Molecular; Log P: Coeficiente de Partição; H:A: Hexano/Acetato de Etila

Figura 1 – Espectro de RMN de ¹H do composto EE04 (sinais ampliados)



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 2 – Espectro de RMN de ¹³C DEPT-Q do composto EE04



Fonte: Elaborado pelo autor.

Conclusões

A obtenção dos novos derivados 2-cianoacetamida apresentaram rendimentos satisfatórios, exceto EE03 e EE05, validando a rota sintética. A elucidação estrutural por técnicas espectroscópica de RMN pode comprovar o sucesso das sínteses, principalmente pela presença do CH metilênico.

Agradecimentos

CAPES; CNPQ; UEPB.

¹BIKALES, N. M. Preparation of acrylamide polymers. In: Water-Soluble Polymers. Springer US., p. 213-225, 1973.

²PATRICK, G. L. An Introduction to Medicinal Chemistry. 4ª ed. New York: Oxford University Press, 2008.



Triagem Fitoquímica e quantificação de fenólicos totais de *Psidium araca* Raddi.

Ewerton Matias de Lima^{1*} (IC), Milen M. M. S. Fernandes² (PG), Micaelly da S. Oliveira² (PG), Leonardo P. Felix¹ (PQ), Maria de Fátima V. de Souza² (PQ), Yanna C. F. Teles¹ (PQ)

Ewerton.m.lima@hotmail.com

¹Universidade Federal da Paraíba, Campus II – Areia, Centro de Ciências Agrárias

²Universidade Federal da Paraíba, Campus I – João Pessoa, Centro de Ciências da Saúde

Palavras Chave: fitoquímica, fenólicos, Myrtaceae

Introdução

A pesquisa fitoquímica tem por objetivo conhecer os metabólitos de espécies vegetais. Quando não se dispõe de estudos químicos sobre a espécie de interesse, a análise fitoquímica preliminar pode indicar os grupos metabólitos secundários relevantes na mesma, por exemplo flavonoides, alcaloides, terpenoides, cumarinas, etc.¹

Os metabólitos secundários são responsáveis por diversas atividades biológicas, por exemplo antimicrobiana, antioxidante, alelopática ou tóxica.²

A espécie vegetal *Psidium araca* Raddi (Myrtaceae) é conhecida como araçá, araçá vermelho, araçá amarelo, araçá coroa, etc. Apresenta folhas simples, opostas, coriáceas, glabras de cor verde reluzente. Os frutos são achatados ou ovoides, coroados pelo cálice de coloração amarela ou vermelha.³ A fruta é usada na alimentação *in natura*, ou na preparações de sucos, geleias, etc.² O fruto é rico em compostos fenólicos, que possuem caráter antioxidante.⁴ Entretanto, não existem estudos acerca dos metabólitos produzidos pelas folhas de *P. araca*.

O objetivo deste trabalho foi realizar triagem fitoquímica utilizando a metodologia descrita por Matos (1997)⁵ e quantificar os fenólicos totais de *P. araca*, utilizando o método espectrofotométrico de Folin-Ciocalteu⁶.

Resultados e Discussão

As folhas foram coletadas na cidade de Areia (PB), identificadas e uma exsiccata depositada no Herbário Jayme Coelho de Moraes (CCA/UFPB). Os extratos foram obtidos por maceração das folhas secas e trituradas, seguidos por rotaevaporação. A triagem fitoquímica foi realizada nos extratos (hexânico, acetato de etila e metanólico) através de reações específicas (de coloração, precipitação e fluorescência). Os resultados mostraram a presença no extrato hexânico de: alcaloides, esteroides e triterpenos; no extrato acetato de etila: alcaloides, saponinas, taninos, esteroides e triterpenos; no extrato metanólico: flavonoides, alcaloides, cumarinas, taninos e quinonas.

Na determinação quantitativa de fenólicos totais dos extratos utilizou-se o método de espectrofotométrico de Folin-Ciocalteu e como padrão o ácido gálico com leitura da absorbância em 760 nm. Com a curva de calibração foi possível obter uma equação da reta com alta precisão $y = 0,000993696x - 0,00218$ e correlação linear $R^2 = 0,99628$. A concentração de fenólicos totais por mg de equivalentes de ácido gálico por gramas de extrato (mg EAG/g) resultou em 52,51, 20,31 e 5,21 mg EAG/g, para os respectivos extratos metanólico, acetato e hexânico. Os fenólicos são substâncias de alto interesse bioquímico pois estão relacionados à atividade antioxidante de diversos vegetais.

Conclusões

A partir das análises realizadas foi possível determinar pela primeira vez os metabólitos secundários em folhas de *P. araca*, contribuindo-se assim com a quimiotaxonomia da família Myrtaceae. Foi possível ainda determinar o conteúdo de compostos fenólicos presentes nos extratos, verificando-se se que os extratos metanólico e acetato de etila apresentam maiores teores de fenólicos, indicando possível atividade antioxidante da espécie *P. araca*.

Agradecimentos

Universidade Federal da Paraíba (UFPB)
Centro de Ciências Agrárias (CCA)

¹ SIMÕES, C. M. O.; SCHENKEL, E. P.; GOSMANN, G.; et al. Universidade/UFRGS/Ed. Da UFSC, 1999.

² LI J, OU-LEE TM, RABA R, AMUNDSON RG, LAST RL. *Plant Cell* 5: 1993, 171-179.

³ CORADIN, L; SIMINSKI, A; REIS, A. Brasília: MMA, 2011.

⁴ SANDRI, Ivana G. et al. *Food Science and Technology*, Campinas, 2014, v. 34, n. 4.

⁵ MATOS, F. J. A. *Introdução à Fitoquímica Experimental*. 2ed. Fortaleza: Edições UFC, 1997.

⁶ AGBOR, G. A. et al; Folin-Ciocalteu Reagent for Polyphenolic Assay. *International Journal of Food Science, Nutrition and Dietetics (IJFS)*, 2014, v. 3, n. 8, p. 147-156.



Síntese de Novos Derivados Tiossemicarbazônicos da Vanilina e suas Atividades Biológicas

DAYANE S. S. SOUZA (IC)^{1*}, MAYARA ELIS A. SILVA (IC)¹, MAGALI J. ARAÚJO (PQ)², DALCI J. BRONDANI (PQ)¹.¹Departamento de Ciências Farmacêuticas, Universidade Federal de Pernambuco, ²Departamento de Antibióticos, Universidade Federal de Pernambuco.

Email: dayane.s.s@hotmail.com

Departamento de Ciências Farmacêuticas, Universidade Federal de Pernambuco, Cidade Universitária, 50470-521 Recife - PE, Brasil

Palavras Chave: Vanilina, atividade biológica

Introdução

Os altos usos de antibióticos ocasionaram com que as bactérias desenvolvessem defesas relativas aos agentes antibacterianos, como consequência o surgimento da resistência. Logo, pesquisas para o desenvolvimento de moléculas bioativas com atividade antimicrobiana é bastante estudada, para uma melhor ação biológica e perspectivas de otimizações dos resultados. Assim como é de grande importância pesquisas por novas substâncias que possuam atividades anticancerígenas para desenvolvimento de fármacos futuros para a ação anticâncer aumentando sua seletividade.

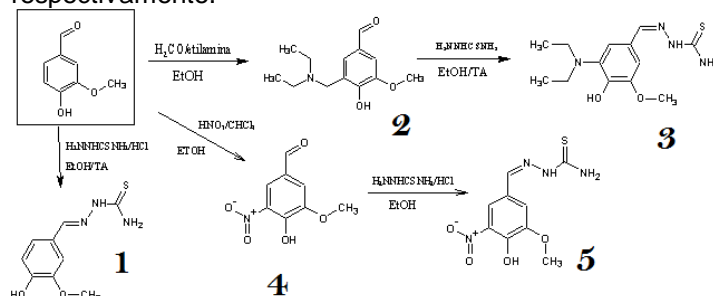
As tiossemicarbazonas apresentam um amplo perfil farmacológico e constituem uma importante classe de compostos cujas propriedades têm sido extensivamente estudadas na Química Medicinal. Nos últimos anos, houve atribuições a esta classe de biomoléculas com atividades: antitumorais, antivirais, antibacterianas, antimaláricas e tripanocida.

Com isso, foram sintetizados cinco derivados vanilínicos e avaliadas frentes as ações biológicas: antimicrobiana nas cepas bactérias: *S. aureus*, *B. subtilis*, *M. luteus*, *S. faecalis*, *E. coli*, *K. pneumoniae*, *M. smegmatis*, *Pseudomonas a.*, *S. aureus* Orsar, *Mallaseia furfur* e a levedura *C. albicans*. E nas linhagens de células cancerígenas: tumorais HEp-2 (carcinoma epidermóide de laringe), HT-29 (carcinoma de cólon), NCIH-292 (câncer de pulmão), MCF-7 (câncer de mama), MOLT-4 (leucemia linfoblástica aguda) e HI-60 (leucemia promielocítica aguda).

Resultados e Discussão

A rota sintética de obtenção das tiossemicarbazonas (**1**, **3** e **5**) e as vanilinas substituídas (**2** e **4**) é apresentada no Esquema 1. Todos os compostos propostos foram sintetizados, purificados com rendimentos satisfatórios e caracterizados por métodos espectroscópicos (RMN e IV). Para a avaliação antimicrobiana, o produto **5** por apresentar o grupo nitro, apresentou inibição: *E.*

coli de 15,5 mm, *S. faecalis* de 14,5 mm e *M. megmatis* de 22,5 mm por Zona Máxima de Inibição (ZMI) usando o comparativo amoxicilina. Já o produto **2** por apresentar amina e aldeído apresentou inibição nas cepas bacterianas: *Pseudomonas a.*, *S. aureus* Orsar e *B. subtilis* e na levedura *C. albicans*. Possuindo da seguinte ordem de 11-11mm, 10-11 mm, <10 mm e 20-20 mm, respectivamente.



Esquema 1: Rota sintética dos derivados vanilínicos

Conclusões

Os compostos obtiveram rendimentos satisfatórios. A avaliação biológica apresentou experimentalmente que o produto **2**, obteve maior percentual de inibição e maior quantidades de cepas inibição nas cepas: *Pseudomonas a.*, *S. aureus* Orsar e *B. subtilis* e na levedura *C. albicans*. Na avaliação anticâncer destes compostos, tiveram um percentual de inibição moderado nas linhagens de células testadas. Assim, com os resultados podemos otimizar as estratégias utilizadas, para futuras pesquisas.

Agradecimentos

A Capes, Propesq e CNPq pelo financiamento do projeto dos projetos de pesquisas do LABSINFA-UFPE.

SILVA, T. F. "Abordagens da Química Medicinal para o Planejamento de Protótipos de Fármacos". Rio de Janeiro: 2013;

SILVA, L.O., "Síntese de Derivados Aril-Semicarbazônicos como Protótipos Moleculares Contra o Trypanosoma cruzi (Antichagas)". Recife: 2008;

GOMES, M. S., "Síntese de Novos Derivados da Primina Via Reação de Mannich e sua Atividade Biológica". Recife: 2014;

SILVA, D. R. C., "Síntese e Avaliação das Atividades Antimicrobiana e Anti-T. Cruzi de Derivados Nitro-Ariltiossemicarbazônicos".



A utilização do Líquido Iônico [Ch]Glu como plastificante na obtenção de biofilmes de amido de mandioca

Ana Claudia de Lima Araújo¹ (IC)*, Rodrigo Silva Córdula Borges² (IC), Renato Pereira Lima¹ (PG), Alex Sandro Bezerra de Sousa¹ (PG), Silvanda de Melo Silva¹ (PQ), Dayse das N. Moreira^{1,2} (PQ).
anac.limaaraujo@gmail.com

¹Departamento de Química e Física, Centro de Ciências Agrárias, Universidade Federal da Paraíba, Campus II, Areia, PB, Brasil

²Departamento de Química, Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Universidade Federal da Paraíba, Campus I, João Pessoa, PB, Brasil.

Palavras Chave: Líquido Iônico, biofilme, amido, plastificante.

Introdução

O desenvolvimento de materiais funcionais sustentáveis baseados em biopolímeros, como o amido, é uma das soluções mais relevantes para os grandes problemas ambientais derivados do uso maciço de materiais não biodegradáveis.¹ O amido vem sendo muito utilizado na preparação de biofilmes, no entanto, devido ao seu caráter hidrofílico seus filmes, geralmente, são quebradiços e apresentam baixa resistência mecânica, podendo limitar suas aplicações. Neste contexto, o uso de plastificantes, como os polióis, na formação de filmes de amido são de extrema importância, pois agem aumentando a mobilidade das cadeias poliméricas.² Uma alternativa ao uso de polióis, são os Líquidos Iônicos (LI), cuja atenção se deve a sua excepcional combinação de propriedades como baixa pressão de vapor, alta estabilidade térmica, baixa inflamabilidade e capacidade de plastificação.¹ Assim, o objetivo deste trabalho foi analisar a influência do líquido iônico [Ch]Glu (glutamato de colínio) como plastificante na obtenção de biofilmes de amido de mandioca pelo método *casting*.

Resultados e Discussão

A primeira etapa deste trabalho consistiu na síntese do LI [Ch]Glu a partir de uma reação de neutralização entre o hidróxido de colina e o ácido glutâmico, em quantidades equimolares sob agitação constante a temperatura ambiente durante 6 horas. Posteriormente, o LI obtido foi utilizado como plastificante para elaboração de biofilmes pelo método de *casting*. A proporção utilizada para o biofilme foi de 3% de amido para 1 e 2% de LI (Tabela 1). Para comparação foi preparado um biofilme utilizando 1% de glicerol como plastificante. As análises de transmitância foram realizadas em um espectrofotômetro Genesys 10S – Thermo Scientific a 700 nm e a espessura foi medida com

um micrômetro manual. Todas as análises foram realizadas em triplicata e a média destas estão expressas na Tabela 1. O glicerol foi utilizado como referência para todos os testes.

Os dados apresentados na Tabela 1 mostram uma pequena diminuição na espessura do filme quando o LI (1%) foi utilizado como agente plastificante. Um aumento no percentual de LI (2%) resultou em uma espessura 44% maior. Com relação aos dados de transparência, a adição do LI em 1% de concentração resultou no maior percentual de transparência e, conseqüentemente, numa menor opacidade do biofilme.

Tabela 1. Dados obtidos a partir de diferentes formulações para obtenção dos biofilmes de amido.

Biofilme	% (m/m)	δ (mm)	I (%)	T (%)
Glicerol	1	0,095	82,87	25,45
[Ch]Glu	1	0,090	80,83	27,55
[Ch]Glu	2	0,130	79,07	19,49

* % (m/m): concentração do plastificante adicionado ao biofilme
 δ : Espessura; I: Transmitância; T: Transparência.

Conclusões

Geralmente, os biofilmes sintetizados a partir de uma matriz de amido apresentam um grau de opacidade ao serem misturados com agentes plastificantes. Neste trabalho, foi observado que a adição do LI [Ch]Glu (1%) contribuiu tanto para o aumento da transparência quanto para a diminuição da espessura, quando comparado ao biofilme padrão de glicerol.

Agradecimentos

Ao CNPq e a UFPB pelo apoio financeiro.

¹ Tomé, L.C.; Silva, N.H.C.S.; Soares, N.R.; et al. *Green. Chem.* **2015**, *17*, 4291.

² Carmo, K.P.; Paiva, J.M.F. *Rev. Virtual Quim.* **2015**, *7*(6), 2377.



Síntese, Caracterização e Propriedades Óticas e Térmicas de Tetraésteres Discóticos Derivados de Azobenzenos.

Thalisson F. Dutra¹ (IC)*, Thamires S. Moreira¹ (PG), Rodrigo Cristiano¹ (PQ).
thalisson_f.dutra@hotmail.com

Departamento de Química, Universidade Federal da Paraíba – UFPB, Campus I, 58051-900, João Pessoa-PB

Palavras Chave: Tetraéster, Azobenzenos, fotoisomerização

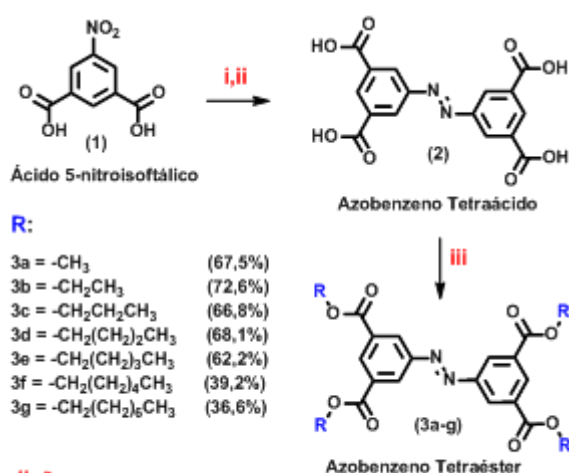
Introdução

Moléculas orgânicas funcionais capazes de exibirem processos de automontagem e auto-organização representam a classe de Materiais Moles (do inglês “Soft Matter”). Cristais Líquidos Discóticos (CLDs) são um exemplo de Material Mole de grande interesse no meio científico e tecnológico, devido seu empacotamento em colunas com elevada mobilidade eletrônica 1D, como um nanofio. A inserção do grupo azo tornou-se atrativo devido agregar propriedades únicas que provocam mudanças de sua forma e propriedades, por estímulos externos de forma reversível,¹ como uma chave liga-desliga da fase CL.² Neste contexto, o trabalho aborda caracterização e síntese de moléculas discóticas contendo o grupo azo, visando o aprimoramento estrutural da molécula para obtenção de propriedades líquido-cristalinas.

Resultados e Discussão

A síntese das moléculas alvo deste trabalho é apresentada no Esquema 1. Para obtenção do tetraácido **2** foi realizada uma síntese partindo do ácido 5-nitroisoftálico através de uma reação de redução, utilizando dextrose em meio alcalino aquoso. Foram incorporadas cadeias alquílicas terminais empregando reações de esterificações de Fisher com álcoois de diferentes cadeias alifáticas, buscando-se propriedades mesomórficas. Todos os compostos foram caracterizados por espectroscopia de absorção na região do Infravermelho (IV) e Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de hidrogênio e carbono ¹³C, e massas. Suas transições térmicas foram investigadas por Microscopia Ótica de Luz Polarizada (MOLP) e Calorimetria Diferencial de Varredura (DSC). Propriedades de isomerização fotoinduzida do grupo azo foram estudadas em solução por espectroscopia de UV-Vis.

Ao observar e comparar as propriedades térmicas, notou-se que as cadeias alquílicas refletem diretamente nas propriedades físicas, com aumento do caráter amorfo diretamente proporcional ao aumento do tamanho da cadeia carbônica.



Condições:

i. Dextrose, NaOH, H₂O, 16h - 80°C; ii. HCl, iii. R-OH, H₂SO₄, refluxo, 24h.

Esquema 1. Síntese dos tetraésteres discóticos derivados de azobenzenos.

Deste modo, houve diminuição dos pontos de fusão em função do aumento linear das cadeias alquílicas. Os espectros de UV-Vis mostraram o comportamento característico de fotoisomerismo, com maior eficiência ao equilíbrio (*E* → *Z*) referente à excitação, quando comparado com o retorno (*Z* → *E*) mais lento, livre de radiação.

Conclusões

Moléculas discóticas derivadas de tetraésteres de azobenzeno foram sintetizadas. O aumento da cadeia carbônica diminui a fusão e aumenta o caráter amorfo destes materiais moleculares. Eles têm assim potencial para aplicação de filmes finos, com o controle da fotoisomerização e propriedades físicas atuando como um interruptor ótico.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, UFPB

¹ Bandara, H.M.D. et al. *J. Org. Chem.* **2010**, 75, 4817-4827.

² Soberats, B. et al. *J. Am. Chem. Soc.*, **2014**, 136, 9552-9555.



Avaliação antifúngica dos compostos mesoiônicos dos sistemas 1,3-tiazólio-5-tiolato e 1,3-diazólio-5-tiolato

Priscila S. V. Lima¹ (PG), Helivaldo D. S. Souza¹ (PG), Daniele de Figueredo Silva¹ (PG), Isabela L. de Anésio (IC), Rafael F. Oliveira (PG), Givanildo L. Fernandes¹ (IC), Genilson S. Pereira (IC), Bruno F. Lira¹ (PQ), Edeltrudes O. Lima¹ (PQ), Petronio F. A. Filho¹ (PQ)*. Email: athayde-filho@quimica.ufpb.br.

¹Universidade Federal da Paraíba, 58051-970, João Pessoa – PB, Brasil.

Palavras Chave: Mesoiônicos, Síntese, Atividade antifúngica.

Introdução

Compostos mesoiônicos constituem um grupo de betaínas heterocíclicas não aromáticas, estabilizados por deslocalização de elétrons e cargas separadas por duas regiões através de ligações simples¹. Apresentam propriedades que podem ser aplicadas na área de cristais líquidos, ótica não-linear, na participação em diversas reações originando outros novos derivados heterocíclicos, e principalmente na área de desenvolvimentos de novos fármacos, uma vez que esses compostos possuem um amplo espectro de atividades biológicas² tais como: antibacteriana, antitumoral, antifúngica, antimalárica, analgésica, anti-inflamatória, anticonvulsivante.

Resultados e Discussão

A metodologia³ envolveu a seguinte rota sintética, (i) reação de Strecker do aldeído **1a-b**, (ii) aroilação de **2a-b** obteve-se o amidoácido **3a-b**, (iii) ciclodesidratação de **3a-b** com Ac₂O seguido de uma cicloadição e cicloversão 1,3-dipolar com CS₂ forneceu o mesoiônico do sistema 1,3-tiazólio-5-tiolato **4a-b**, (iv) alquilação de **4a** com CH₃I obtivesse **5a** como sal iodato do mesmo sistema e (v) tratamento de **5a** com CH₃NH₂/(CH₃)₂CHNH₂ forneceu **6a** e **6a'** mesoiônicos do sistema 1,3-diazólio-5-tiolato na forma de bases livre:

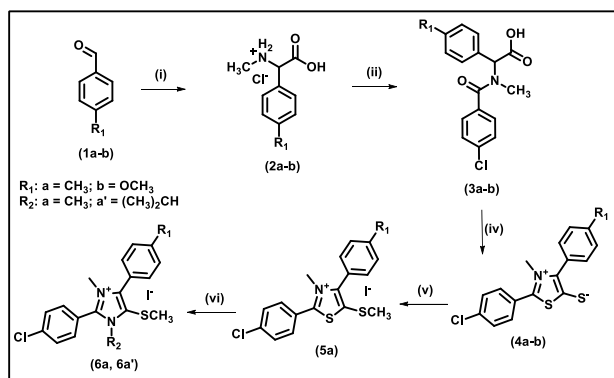


Figura 1. Síntese dos compostos mesoiônicos

Os quatro compostos sintetizados foram recristalizados em EtOH/H₂O e apresentaram rendimentos entre 68-89% e foram caracterizados por técnicas espectroscópicas de IV, RMN ¹H e ¹³C. Para os compostos **4a-b**, **6a** e **6a'** foram testados a atividade antifúngica nas cepas de *Candida*, sendo três de *Candida Albicans* (ATCC 76645, LM 86, LM 111) e três de *Candida Tropicalis* (ATCC 13803, LM 6, LM20). O composto **4a** e **4b** apresentou inibição frente a duas (**33,33%**) das seis cepas (*C. Albicans* ATCC 76645 e *C. Tropicalis* ATCC 13803) com uma CIM de 64 µg/mL. Os compostos **6a** não apresentou inibição em nenhuma das cepas. E o composto **6a'** apresentou inibição sobre cinco (**83%**) das seis cepas (*C. Albicans* ATCC 76645; *C. albicans* LM 86; *C. albicans* LM 111; *C. tropicalis* ATCC 13803; *C. tropicalis* LM 6) com CIM de 64 µg/mL.

Conclusões

A rota sintética utilizada para a síntese dos compostos mesoiônicos e seus derivados mostrou-se ser simples, eficaz e apresentou bons rendimentos. Na avaliação antifúngica, dos quatro compostos mesoiônicos investigados, apenas três (**4a**, **4b** e **6a'**) apresentaram inibição positiva com CIM de 64 µg/mL, sendo que o composto **6a'** apresentou uma inibição de **83%** contras cinco das seis cepas.

Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq e CAPES pelo apoio financeiro e ao LPBS pela realização do trabalho.

¹Oliveira, M. B. et al. *Phosphorus, Sulfur, Silicon and the Related Elements*. **1996**, *108*, 75-84.

²Athayde-Filho P.F et al, *Acta Pharmaceutica Bonaerense*, **1999**, *18*, 17.

³Shiba S et al, *Bulletin of the Chemical Society of Japan*., **1970**, *43*, No. 12, 3941-3942.



Híbridos Moleculares de 1,2,4-Oxadiazóis e Naftoquinonas Com Potencial Atividade Biológica

Brenno Fernandes da C. Lima^{1,*} (IC), Luan Crispim Gonçalves Ramos¹ (IC), Juliana Alves Vale (PQ), José Maurício dos Santos Filho² (PQ), Sávio Moita Pinheiro¹ (PQ)

¹ Depto. de Química, Universidade Federal da Paraíba, Campus I, João Pessoa-PB, 58051-970; ² Depto. de Engenharia Química, Universidade Federal de Pernambuco, Recife-PE, 50670-901. *brennofcl@hotmail.com

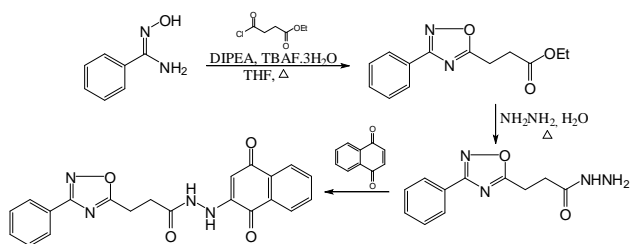
Palavras-chave: 1,4-naftoquinona, oxadiazóis, citotoxicidade.

Introdução

Em Química Medicinal, a hibridização molecular orienta o planejamento sintético de moléculas com potencial bioativo. O anel heterocíclico 1,2,4-oxadiazólico associado a uma *N*-acil-hidrazona apresenta relevante atividade antichagásica ao inibir a enzima TCC no parasita *Trypanossoma cruzi*.¹ Já compostos contendo o anel quinóidico, por formarem espécies oxidativas de oxigênio, também podem atuar como agentes antichagásicos. Dessa forma, propôs-se a síntese de híbridos moleculares *N*-acil-hidrazonas, anéis 1,2,4-oxadiazóis e 1,4-naftoquinonas com o objetivo de avaliar o sinergismo dessas estruturas privilegiadas em testes antichagásicos.

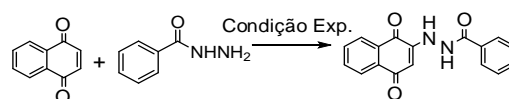
Resultados e Discussão

O esquema 1 descreve a proposta de síntese dos híbridos de hidrazidas e 1,4-naftoquinonas. A tentativa de unir os fragmentos hidrazida e 1,4-naftoquinona foi avaliada em uma reação-modelo para definir os melhores parâmetros experimentais em um sistema mais simples. O uso de NMP a t.a. é descrito como eficaz na adição 1,4 de aminoácidos a quinonas.² Nessa mesma condição, o possível produto foi obtido em 13% (entrada 1, tabela 1). Empregando uma catálise ácida em DMSO, observou-se a formação do mesmo produto em 27% de rendimento, o melhor resultado.



Esquema 1. Proposta sintética para obtenção do híbrido de 1,2,4-oxadiazol e 1,4-naftoquinona.

Tabela 1 – Reação-modelo de adição a quinona.



Entrada	Condição Experimental	Rendimento ^b
1	NMP ^a , t.a.	13%
2	Etanol, t.a.	N.P.
3	Etanol, CeCl ₃ .7H ₂ O, t.a.	N.P.
4	DMSO, t.a.	N.P.
5	DMSO, CeCl ₃ .7H ₂ O, t.a.	12%
6	DMSO, ácido acético, t.a.	27%
7	DMSO, ácido acético, 70°C	N.P.
8	Acetonitrila, ácido acético, t.a.	N.P.
9	Acetonitrila, t.a.	16%
10	DMSO, 120°C	10%
11	DMSO, TBAF, t.a.	9%
12	NMP, NaOH, t.a.	N.P.
13	BMIM. PF ₆ , DABCO, t.a.	N.P.

^aN-metilpirrolidona; ^bNP: não purificado.

Mesmo com a busca da melhor condição experimental para promover a conexão entre a hidrazida e a quinona, iniciamos a síntese em pequena escala do intermediário 1,2,4-oxadiazol descrito no esquema 1, que foi obtido em 90% de rendimento.

Conclusões

Apesar da literatura descrever a adição de aminoácidos a quinonas, hidrazidas são menos reativas, o que justifica os dados apresentados. No momento, estão sendo avaliados novos procedimentos para realizar essa adição. O produto formado encontra-se em fase de caracterização estrutural.

Agradecimentos

À Central Analítica da UFPE pelas análises e à UFPA pela estrutura.

¹ Dos Santos Filho *et al.* Biorog. Med. Chem. **2009**, *71*, 6682.

² Moraes, T. A. P. *et al.* *Molecules* **2014**, *19*, 13188.



Síntese e caracterização de CLs não convencionais contendo duas unidades eletrônicas distintas

Fernanda Silva Soares (IC)*,¹ Welisson de P. Silva (PG),¹ Rodrigo Cristiano (PQ)¹. E-mail: fernandaqi@hotmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Federal da Paraíba – UFPB, Campus I, 58051-900, João Pessoa-PB

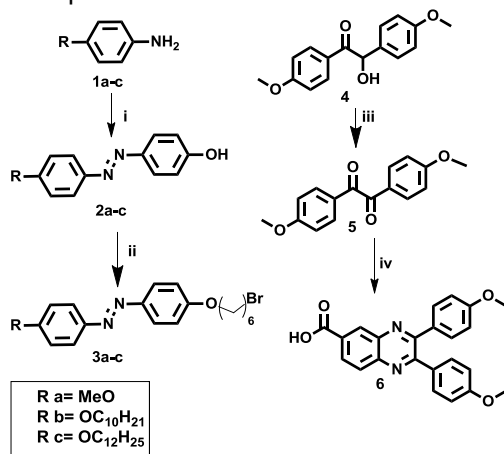
Palavras Chave: Azobenzeno, Cristal líquido, benzopirazina.

Introdução

Cristais Líquidos (CLs) são materiais inteligentes eletrônicos com propriedades de ordem e fluidez, que podem ser funcionalizados para o aprimoramento das propriedades de transporte de carga, luminescência, sensores, catálise etc. O grupo azo é conhecido por sua fotoisomerização *E-Z*, que pode ser usado, quando inserido em um mesógeno, no controle da fase líquido cristalina como um fotointerruptor reversível¹. A quinoxalina (benzopirazina) por outro lado pode ser aplicada como um transporte de elétrons, devido a sua facilidade de preparação e estabilidade térmica². Neste contexto, este trabalho apresenta a síntese de compostos contendo uma extremidade eletrônica absorvedora contendo grupo azo e a outra emissora contendo o anel quinoxalina, conectadas entre si através de uma cadeia alquílica flexível.

Resultados e Discussão

Os compostos **3a-c** e **6** preparados de acordo com o Esquema 1.



Esquema 1. Síntese dos intermediários chave para o trabalho. i) HCl, NaNO₂, NaOH, fenol (0°-5°C); ii) 1,6-dibromohexano, K₂CO₃, acetona, refluxo 24h; iii) CuSO₄·5H₂O, Piridina, H₂O, refluxo 6h. iv) Ácido 3,4-diaminobenzoico, ÁcOH, refluxo 8h.

A primeira etapa envolve uma reação de azo acoplamento para obtenção dos intermediários azobenzenos **2a-c**. Estes foram submetidos a uma reação de O-alkilação com o 1,6-dibromohexano para obtenção dos compostos azobenzenos contendo uma cadeia flexível com um bromo terminal (**3a-c**). Em seguida foi realizado uma reação de oxidação da anisoína para formar o composto dicarbonilado (**5**) para seguinte reação de acoplamento com o ácido 3,4-diaminobenzoico para a obtenção do ácido (**6**). Os compostos foram caracterizados através de técnicas de RMN ¹H, RMN ¹³C e IV.

As propriedades térmicas foram estudadas por Microscopia Ótica de Luz Polarizada (MOLP) e Calorimetria Diferencial de Varredura (DSC).

Dentre os compostos preparados, **3b** e **3c** apresentaram mesomorfismo esmétrico com fase SmA enantiotrópica, com faixas similares de temperatura (com uma diminuição do ponto de fusão com o aumento da cadeia alquílica).

Conclusões

Os compostos **3b** e **3c** apresentaram comportamento líquido cristalino. O trabalho está em andamento e a próxima etapa consiste na esterificação do ácido **6**, contendo anel benzopirazina, com os intermediários **3a-c** contendo o grupo azobenzeno e, por fim, avaliar as propriedades térmicas e óticas dos compostos finais com esses grupos eletronicamente distintos na mesma molécula.

Agradecimentos

CAPES, UFPB e CNPq.

¹ Bandara, H.M.D. *et al. J. Org. Chem.* **2010**, 75, 4817-4827.

² Kuo, H.-M. *et al. Tetrahedron* **2016**, 72, 6321- 6333.



Cristal líquido colunar baseado em Benzo[ghi]perileno diimida

Marília G. B. Cabral*¹ (PG), Deise M. P. O. Santos² (PQ), Larissa G. França³ (PG), Ahmed Bentaleb² (TC), Elizabeth A. Hillard² (PQ), Fabien Durola² (PQ), Hugo Gallardo³ (PQ), Juliana Eccher³ (PQ), Harald Bock² (PQ), Rodrigo Cristiano¹ (PQ) *email: mariliagabriela.qi@gmail.com

¹ Universidade Federal da Paraíba, Departamento de Química, João Pessoa, Brasil

² Centre de Recherche Paul Pascal, Université de Bordeaux & CNRS, France

³ Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil.

Palavras Chave: Reação de Perkin, Ciclização intramolecular, Imidas policíclicas aromáticas, Cristal líquido colunar.

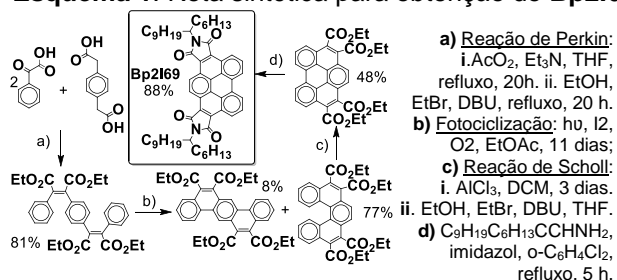
Introdução

Imidas aromáticas policíclicas (PAI) são sistemas com elevada conjugação e robustez capazes de apresentar comportamento líquido cristalino colunar e elevado transporte de carga, atraindo interesse de pesquisadores quanto à síntese e aplicabilidade em dispositivos como, por exemplo, células solares orgânicas (OSC).^{1,2,3} Nesse contexto, esse trabalho apresenta a síntese de uma nova molécula (**Bp2169**) baseada no centro aromático benzo[ghi]perileno, contendo duas imidas como grupos funcionais e cadeias laterais flexíveis assimétricas, bem como o estudo suas propriedades térmicas e eletro-ópticas.

Resultados e Discussão

A molécula-alvo **Bp2169** foi obtida seguindo a rota sintética apresentada no **esquema 1**.

Esquema 1. Rota sintética para obtenção do **Bp2169**



O estudo das propriedades térmicas foi avaliado através das técnicas de microscopia óptica de luz polarizada (MOLP) acoplado a um sistema de aquecimento, calorimetria diferencial de varredura (DSC) e difração de raios X (DRX). **Bp2169** exibiu fase líquido cristalina colunar hexagonal (Col_H) à temperatura ambiente (T_{amb}), fazendo desta PAI a primeira diimida a apresentar essa mesofase termodinamicamente estável a T_{amb} e com ampla faixa, até 266°C, onde há a transição para o estado isotrópico. Foi observado no difratograma de raio X reflexões características de arranjo hexagonal. Fotomicrografias obtidas por MOLP revelou uma textura *six-fold* que indica uma tendência de

alinhamento homeotrópico espontâneo da fase Col_H, requisito importante para aplicações tecnológicas. As propriedades fotofísicas foram analisadas por absorção no Uv-Vis (Abs) e fotoluminescência (PL) tanto em solução de CHCl₃ quanto em filme fino obtido pela técnica de *spin-coating* (**Tabela 1**).

Tabela 1. Propriedades fotofísicas

Abs(sol) (nm)	PL(sol) (nm)	Abs(filme) (nm)	PL(filme) (nm)	^a Φ(sol) (%)	^a Φ(filme) (%)	^b E _g ^{opt} (eV)
498	530	510	573	62	21	2,34

^a O rendimento quântico (Φ) calculado utilizando uma esfera integradora. ^b Onset da banda de absorção Uv-vis em solução.

A caracterização eletroquímica foi realizada por voltametria cíclica (CV) e de pulso diferencial (DPV). Os resultados indicaram **Bp2169** como um bom doador de elétrons comparado à outras PAIs e com boa energia de ligação de éxciton (E_{BE}) (**Tabela 2**).

Tabela 2. Caracterização eletroquímica

^a 1°ox (eV)	^a 1°red (eV)	^b E _{HOMO} (eV)	^b E _{LUMO} (eV)	E _g ^{el} (eV)	^c E _{BE} (eV)
1,27	-1,42	-6,07	-3,38	2,69	0,37

^a Determinado por DPV. ^b A partir da E_{1/2} (Fc+/ Fc) a 4,8 eV abaixo do nível do vácuo. ^c Diferença de energia entre E_g^{el} e E_g^{opt}

Conclusões

Síntese com alto rendimento e boas propriedades como mesofase Col_H à temperatura ambiente, alinhamento homeotrópico espontâneo, ampla absorção na região Uv-Vis, níveis de energias do HOMO e LUMO compatíveis para construção de dispositivos em bicamada e boa E_{BE}, tornam **Bp2169** um material promissor para aplicação em OSC. Estudos estão realizados pelo grupo de pesquisa LOOSA do Departamento de Física da UFSC.

Agradecimentos

CAPES, COFECUB e PROCAD.

¹ Zhao D. *et al.* *New J. Chem.* **2016**, *40*, 113.

² Cabral, M. G. B. *et al.* *ChemPlusChem* **2017**, *82*, 342.

³ Ferreira, M. *et al.* *Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 4391.



Triagem virtual baseada nas estruturas dos ligantes e receptores para selecionar compostos de um banco de dados de lactonas sesquiterpênicas de Asteraceae com potencial atividade leishmanicida.

Chonny Herrera-Acevedo (PG)¹, Luciana Scotti (PQ)¹, Marcus Tullius Scotti (PQ)^{1,2*}

¹Universidade Federal da Paraíba, Programa de Pós-Graduação em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos - Campus I.

² Universidade Federal da Paraíba. Departamento de química -Campus I.

* mtscotti@gmail.com

Palavras Chave: *Leishmania donovani*, Triagem virtual, Asteraceae, Lactonas sesquiterpênicas, Aprendizado de máquina

Introdução

Entre os produtos naturais, que têm sido uma fonte de inspiração no desenvolvimento de agentes terapêuticos, destacam-se as lactonas sesquiterpênicas (LSS), as quais já têm apresentado atividade contra doenças parasitárias¹⁻³.

Neste trabalho, foi desenvolvida uma aproximação combinada dos resultados de probabilidade obtidos de uma triagem virtual (TV) baseada na estrutura dos ligantes e uma triagem virtual baseada na estrutura dos receptores, o que permitiu a seleção de algumas LSS com potencial atividade leishmanicida.

Resultados e Discussão

Inicialmente foi feita uma TV baseada nas estruturas dos ligantes, desenvolvendo modelos Random Forest (RF) em Knime, para amastigota e promastigota de *L. donovani* usando um set de 1.306 lactonas sesquiterpênicas (LSS), cujas estruturas estão armazenadas no banco de dados Sistemax (<http://sistemax.ufpb.br>) e moléculas com testes de atividade leishmanicida *in vitro* obtidas do ChEMBL. Sendo calculada a probabilidade de atividade leishmanicida das 1.306 LSS. Estruturalmente, foi observado que no caso das promastigotas as 5 moléculas são dímeros de LSS entanto para amastigotas dois classes de esqueletos são observados guaianolídeos e germacranolídeos.

Em seguida, no software Molegro, realizou-se uma TV baseada na estrutura dos receptores, (docking molecular) usando todo o conjunto de LSS e três proteínas alvo de *L. donovani*: N-miristoil transferase (NMT), ornitina decarboxilase (ODC) e MPK3. Dois dímeros de LSS obtidos de *Smanthallus sonchifolius*: enidrina e uvedafolina apresentaram os menores valores de energia para as três enzimas alvo de *L. donovani* testadas

Finalmente, foram combinados os resultados de probabilidade obtidos nas metodologias anteriores,

com a finalidade de verificar as moléculas potencialmente leishmanicidas bem como elucidar seu possível mecanismo de ação, permitindo a identificação de compostos *multitarget*. A probabilidade combinada foi calculada mediante a equação: $p_c = p_s + (1+TN) \times p / 2+TN$; onde p = probabilidade da TV baseada na estrutura dos ligantes, p_s = Probabilidade na TV baseada na estrutura dos receptores. p_c = Probabilidade combinada e TN a taxa de falsos negativos da validação cruzada.

Tabela 1. Estruturas melhor classificadas na aproximação combinada de triagens virtuais.

Proteín	Amastigota				Promastigota			
	LS	p	p_s	p_c	LS	p	p_s	p_c
NMT	Enidrofolina	0.66	0.99	0.78	Japonicon V	0.61	0.87	0.70
ODC	Enidrofolina	0.66	1	0.78	Bedforia Sym.	0.72	0.61	0.68
MPK3	Enidrofolina	0.66	1	0.78	Bedforia Sym.	0.72	0.61	0.68

Conclusões

Usando uma abordagem combinada de TV baseada em estrutura e em ligantes, foi possível a identificação de LSS leishmanicidas *multitarget*, sendo enidrofolina um interessante dímero de SLL que age nas amastigotas de *L. donovani*.

Agradecimentos

Gostaríamos de agradecer ao CNPq e Capes pelo Apoio Financeiro e o Programa estudante convenio - Pós-Graduação (PEC-PG) do CNPq-Brasil.

¹ C. Herrera Acevedo, L. Scotti, M. Feitosa Alves, M. F. M. Diniz, M. Scotti, *Molecules* **2017**, *22*, 79

² T. J. Schmidt, A. M. Nour, S. A. Khalid, M. Kaiser, R. Brun *Molecules*, **2009**, *14*, 2062-2076

³ D. J. Newman, G. M. Cragg, *J. Nat. Prod* **2016**, *79*, 629-661



Fármacos de combate ao câncer: Algumas possíveis aplicações no ensino de funções orgânicas

Edgley Alves Batista* (IC), Lorrane Lima (IC), Iza Fernanda Barbosa da Silva (IC), Jacqueline Morais da Costa (PG), Railton Barbosa de Andrade (PQ)

Edgley-alves@hotmail.com

Departamento de Química, CCEN, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, PB, Brazil, 58.059-900.

Palavras Chave: Ensino de Química Orgânica, Moléculas, Câncer.

Introdução

Atualmente desempenhar atividades educacionais está atrelado a grandes desafios. Um desses desafios envolve ofertar um ensino que promova um debate relacionando a ciência com suas aplicações tecnológicas, sociais, políticas, étnicas, religiosas, econômicas e ambientais. As dificuldades no ensino e aprendizagem de química orgânica podem ser minimizadas através da contextualização¹. Para interdisciplinar as aulas de química pode-se utilizar a seguinte temática: *Fármacos e Química Orgânica*. Pesquisa da síntese de fármacos envolve a identificação da relação entre as estruturas químicas das moléculas e a sua atividade. Nesse contexto os medicamentos são entendidos como substâncias químicas que possuem propriedades que podem atuar na prevenção e também na cura de muitas doenças em seres humanos². Esse trabalho é uma tentativa de mostrar como incluir o tema gerador câncer nas aulas sobre as funções orgânicas.

Resultados e Discussão

Inicialmente a pesquisa objetivou-se sobre associar moléculas com algum tipo de câncer. A triagem de referências contemplou artigos que mostrassem a estrutura molecular de tais substâncias. Entre as referências encontradas, destacamos o site PubChem³ como uma opção para fomentar tanto informações sobre as moléculas como também a visualização das estruturas. Entre as moléculas escolhidas, fundamentaram-se alguns dados e constatou-se que a utilização dessas moléculas pode ser utilizada nas aulas sobre o conteúdo de funções orgânicas. Apesar de ser um site em inglês, podemos facilmente ter as informações traduzidas para o português. De acordo com o PubChem, a Vincristina é um alcalóide natural que pode ser isolado da planta *Vinca rosea Linn*. É um agente antineoplásico de alcalóide de vinca. Os alcalóides da *Vinca* tornaram-se clinicamente úteis desde a descoberta de suas propriedades antitumorais em 1959.

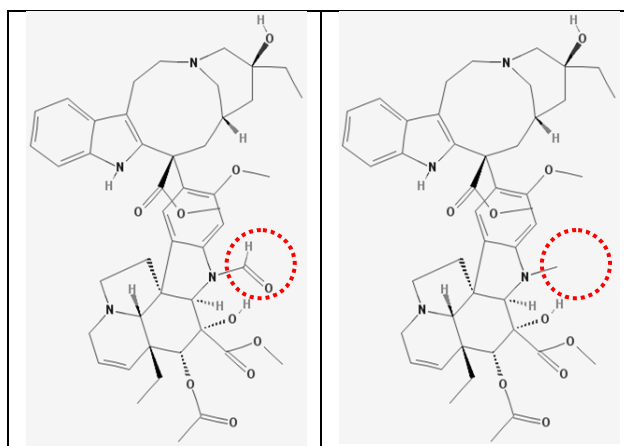


Figura 1: Estrutura molecular das moléculas estudadas Vincristina (a), Vinblastina (b).

Ambas as moléculas Vincristina e Vinblastina podem ser consideradas em uma avaliação comum com relação às funções orgânicas, variando apenas o grupo funcional aldeído (COH-) ligado ao nitrogênio conforme Figura 1. Além da presença desse grupo funcional, é possível encontrar outros, como por exemplo, álcool, aldeído, amina, aromático, éster e éter.

Conclusões

A utilização do site PubChem pode se enquadrar como um objeto que pode facilitar na aplicação dos conteúdos de funções orgânicas no tocante a mostrar as estruturas de algumas moléculas e aplicações no combate ao câncer.

Agradecimentos



¹ Costa, Aline. Dissertação de mestrado. Florianópolis, SC, 2012.

² Fazenda, I. C. A. - Interdisciplinaridade: Didática e Prática de Ensino. Revista interdisciplinaridade. N.:6. 2015.

³ PubChem. Disponível em <https://www.pubchem.ncbi.nlm.nih.gov> Acesso em 01 set. 2017.



Síntese de chalconas com potencial atividade biológica

Renata Rayane da Silva Santana¹ (IC)*, Neide Queiroz² (PQ).

*renatasantana672@gmail.com

Departamento de Química, UFPB- João pessoa.

Palavras Chave: *Síntese, Flavonóide, Chalcona.*

Introdução

Os flavonóides são constituintes fenólicos geralmente encontrados em uma variedade de frutas, vegetais e plantas medicinais. Ensaio *in vitro* e *in vivo* demonstraram os efeitos antioxidante, anti-inflamatório, fotoprotetor, antidepressivo, antimicrobiano e citotóxico dos flavonoides¹. De acordo com o padrão de substituição dos anéis A, B e C da estrutura básica, os flavonóides têm como uma de suas classificações as chalconas que são cetonas aromáticas, na qual, quimicamente consistem em flavonóides de cadeia aberta. O termo chalcona é uma atribuição genérica dada aos compostos que possuem dois anéis fenílicos, separados por uma cadeia de três carbonos, contendo uma carbonila conjugada com dupla ligação (α , β -insaturadas), formando um sistema enona que torna esse composto biologicamente ativo. Elas são amplamente exploradas por apresentarem grande atividade biológica frente a uma série de doenças, dentre as quais se podem destacar atividades: anticarcinogênica, anti-inflamatória, antiviral, antibacteriana, antidepressiva, e outros. São sintetizadas via condensação de Claisen-Schmidt (condensação aldólica), em que se reage, um derivado escolhido da acetofenona com os aldeídos aromáticos apropriados, usando um solvente polar e uma base como catalisador.

Portanto, este trabalho tem como objetivo geral a síntese e caracterização de análogos oxigenados de chalconas, ou sendo mais específico, a síntese da 1-(4-Hidroxifenil)-3-fenilpropenona e 3-(2-Hidroxifenil)-1-fenilpropenona.

Resultados e Discussão

A 3-(2-Hidroxifenil)-1-fenilpropenona apresentou ponto de fusão de 140-141°C e rendimento satisfatório de 61,6%. Sua confirmação estrutural foi feita, inicialmente por análise espectroscópica de infravermelho (IV), a fim de observar a presença dos seus grupos funcionais característicos, e posteriormente por espectroscopia de RMN de ¹H (400 MHz), mostrado respectivamente nas Figuras 1 e 2, a seguir.

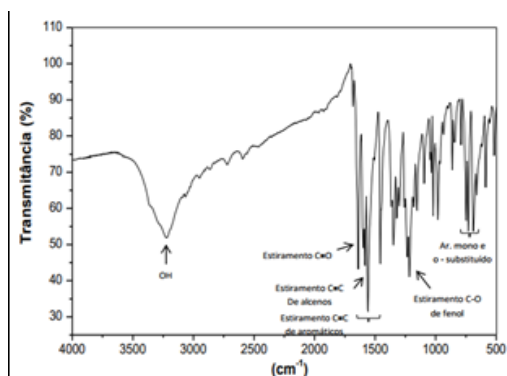


Figura 1. Espectro de IV para a 3-(2-Hidroxifenil)-1-fenilpropenona.

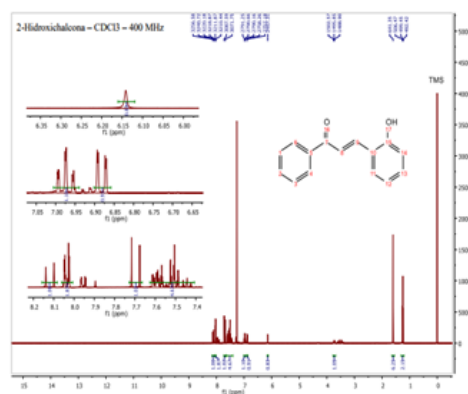


Figura 2. Espectro de RMN ¹H.

Conclusões

Através da condensação aldólica de Claisen-Schmidt em catálise básica, foi possível a obtenção da 3-(2-Hidroxifenil)-1-fenilpropenona a partir da acetofenona e salicilaldeído. Observou-se que as técnicas de espectroscopia de infravermelho (IV) e ressonância magnética nuclear (RMN ¹H) foram eficazes para a determinação das estruturas e propriedades químicas dos produtos formados.

Agradecimentos

Universidade Federal da Paraíba. À Prof^a Dr^a Neide Queiroz. Laboratório de combustíveis e materiais – LACOM. CNPQ.

¹Guan LP, Liu BY. Antidepressant like effects and mechanisms of flavonoids and related analogues. European Journal of Medicinal Chemistry. 2016; 121(4): 47-57.



Estudo fitoquímico e atividade inseticida das folhas *Piper tuberculatum* sobre a *Plutella xylostella*.

Rodrigo Bastos (IC)^{1*}, Marcilio M. de Moraes (PQ)¹, Carolina Araujo (PG)¹ e Claudio A.G. da Camara (PQ)¹.

Universidade Federal Rural de Pernambuco, Departamento de Química, Rua Dom Manoel de Medeiros s/n, 52.171-030 Recife, PE, Brasil. Tel.: +55 81-3320-6381; fax: +55 81-3320-6370. E-mail: rodrigobastos@live.com.

Palavras Chave: *Piper tuberculatum*, piplartina, *Plutella xylostella*, Concentração media letal, Contato Residual.

Introdução

Piper é o gênero com maior número de espécies da família Piperaceae. Análises fitoquímicas de espécies do gênero revelam a presença de diversas classes de compostos como: alcaloides, fenilpropanoides, flavonoides, lignanas e amidas¹. A piplartina (Figura 1) é uma importante amida relatada para diversas espécies do gênero, responsável por apresentar diferentes tipos de atividades biológicas^{2,3}. Entre as espécies produtoras de piplartina a *P. tuberculatum*, encontrada em Pernambuco, é relatada por apresentar altos percentuais da substância⁴. Desta forma, o presente trabalho tem como objetivo o isolamento da piplartina das folhas de *P. tuberculatum* e a avaliação da atividade inseticida dos extratos da planta e da piplartina sobre a *Plutella xylostella*, uma importante praga agrícola, responsável por grandes prejuízos nos cultivos de *Brassicacae*.

Resultados e Discussão

Foi preparado extrato etanólico das folhas de *P. tuberculatum* coletada no Campus da Universidade Federal Rural de Pernambuco. O extrato das folhas analisado por CLAE revelou a presença de um pico predominante com percentuais relativos de 65%. Fracionamento cromatográfico do extrato de *P. tuberculatum* usando gradiente de Hexano:acetato de etila seguido de análise por CG-EM revelou a amida piplartina como o principal constituinte do extrato.

Atividade inseticida do extrato das folhas da *P. tuberculatum* além da piplartina foram avaliadas no teste de contato residual contra a *Plutella xylostella*.

Os testes de contato residual das folhas e piplartina revelaram uma concentração media letal (CL₅₀) de 2,71 mg/mL e 8,14 mg/mL, respectivamente. O extrato das folhas se mostraram cerca de 4 vezes mais tóxicos a *P. xylostella* do que a substancia pura.

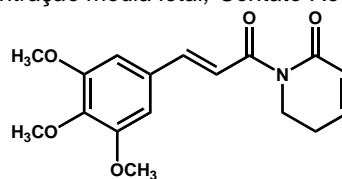


Figura 1. Estrutura da piplartina.

A maior atividade apresentada pelo extrato das folhas quando comparado a seu principal constituinte, a piplartina, pode ser justificada pela ação sinérgica entre outros compostos presentes no extrato.

Tabela 1. Atividade de contato residual do extrato das folhas de *P. tuberculatum* e da piplartina sobre a *P. xylostella*.

	N	CL ₅₀ (mg/mL) (95% I.C.)	χ^2	G.L.
<i>P. tuberculatum</i>	558	2,71 (1,18 - 7,65)	5,36	4
Piplartina	918	8,14 (5,06 - 14,15)	11,65	8

N= Número total de larvas por bioensajo. CL₅₀= concentração letal para matar 50% dos indivíduos. χ^2 = Qui-quadrado. G.L.= Grau de liberdade.

Conclusões

O extrato das folhas de *P. tuberculatum* se mostrou rico em piplartina. Tanto o extrato folhas de *P. tuberculatum* e a piplartina se mostraram tóxicos a *P. xylostella* no teste de contato residual.

Agradecimentos

CAPES, FACEPE e CNPQ.

¹ Silva, A.L. et al., Rev. Bras. Pl. Med. **2013**, 15, 670.

² Bezerra, D. P. et al., J. Appl. Toxicol, **2008**, 28, 599.

³ Santana, H.T. et al., Rev. Bras. Pl. Med. **2015**, 17,105.

⁴ Navickiene, H. M. D. et al., Pest. Manag. Sci. **2007**, 63, 399.



Toxicidade de acetamidas frente a *Artemia Salina* Leach .

Veronica de Lima Santos (IC)*, Rafael F. Oliveira¹ (PG), Min-Fu N. Huang¹ (PG), Helivaldo D. S. Souza¹ (PG), Isabela Lira Anesio (IC), Marçal de Queiroz Paulo¹ (PQ), Francinara S. Alves¹ (IC), Petrônio F. de Athayde-Filho¹ (PQ), Normando A. da Silva Costa (PG). Email: veronica_lima_santos@yahoo.com.br

¹Universidade Federal da Paraíba, 58051-970, João Pessoa – PB, Brasil.

Palavras Chave: Sínteses, *Arthemias Salina*, Toxicidade, Citotoxicidade, .

Introdução

Os testes de toxicidade têm por objetivo avaliar ou prever os efeitos tóxicos nos sistemas biológicos e dimensionar a toxicidade relativa das substâncias¹. A maioria dos experimentos que tem como objetivo testar a toxicidade, utiliza modelos baseados em ratos e camundongos em crescimento, porém esse método requer uma grande quantidade de amostra e tem um custo elevado².

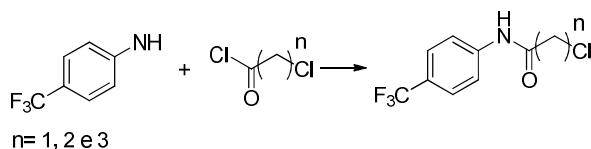
A utilização do microcrustáceo de *Arthemias Salina* para a realização de ensaios de toxicidade vem sendo bastante utilizado por se tratar de um teste de baixo custo, rápido, eficiente, que requer uma pequena quantidade de amostra, não requer métodos assépticos, e nem a utilização de equipamentos especiais. A simplicidade desse teste favorece a sua utilização rotineira, podendo ser desenvolvido no próprio laboratório³.

As acetamidas são compostos derivados das amidas e apresentam estruturas semelhantes ao paracetamol, fármaco já conhecido.

Resultados e Discussão

As acetamidas foram obtidas a partir da reação entre os cloretos de ácidos e anilinas em THF.

Figura 1. Síntese das acetamidas.



Os compostos foram obtidos com rendimento de 80-90% e foram caracterizados com métodos espectroscópicos de Infravermelho e RMN ¹H.

No espectro de infravermelho a banda de absorção correspondente ao estiramento do grupo carbonila ocorreu na faixa de 1650 cm⁻¹ e da amida em 3200 cm⁻¹

No espectro de RMN ¹H (200 MHz em CDCl₃) dos compostos, podemos observar em 4,17 ppm a presença de um singleto com integral para 2H referente aos hidrogênios alfa carbonila, na

região de 8,3 ppm encontra-se um singleto largo com integral para 1H referente ao hidrogênio ligado ao nitrogênio a (N-H), os demais sinais são referentes aos hidrogênios aromáticos, um dubleto em 7,54 ppm, tripleto em 7,35 ppm e outro tripleto registrado em 7,16 ppm. No espectro de RMN ¹³C (50 MHz, CDCl₃), observamos o sinal relativo ao carbono alfa carbonila registrado 43 ppm, temos então o carbono carboxílico em 164,01 ppm e os carbonos aromáticos com sinais em 136,77 ppm, 129,22 ppm, 125,35 ppm e 120,27 ppm. Os compostos foram submetidos aos ensaios biológicos para avaliação de toxicidade frente a *Arthemias Salina*. A concentração letal (CL₅₀) para as três acetamidas testadas foram inferiores a 50 µg/mL.

Conclusões

A rota sintética das acetamidas mostrou-se simples, eficaz e apresentando bons rendimentos. Os resultados da atividade tóxica frente à *Arthemias Salina* nos revelou uma toxicidade relativamente alta com uma CL₅₀ <50 µg/mL esse resultado aponta segundo Mayer⁴ que as acetamidas testadas possuem alta toxicidade e alta citotoxicidade. Essa avaliação mostra Características interessantes em relação à estrutura versus atividade das acetamidas demonstrando que o alongamento da cadeia não influenciou na toxicidade dos compostos.

Agradecimentos

Ao CNPQ e CAPES pelo apoio financeiro.

¹E Forbes, V. E. e Forbes, T. L. Chapman and Hall, 1994. 247 p.517.

²Rios, F. J. B. sp.1995. Dissertação (Mestrado em Bioquímica) – Universidade Federal do Ceará, Fortaleza-Ce.

³Siqueira J.M.; Bomm M.D.; Pereira N.F.G.; Garcez W.S. e Boaventura M.A.D., Quím Nova 1998;

⁴Meyer, B. N.; Ferrigni, N. R.; Jacobsen, L. B e Nichols, D. E., Journal of Medical Plant Research, 1982, 45, 31-34..



Estudos espectroscópicos de dicetonatos de íons lantanídeos com ligantes fosfinóxidos

Jandeilson L. Moura¹ (PG)*, Israel F. Costa¹ (PG), Paulo R. S. Santos¹ (PG), Ercules E. S. Teotonio¹ (PQ)

*jandeilsonlimamoura@hotmail.com

¹Universidade Federal da Paraíba, Departamento de Química, João Pessoa, PB, Brasil.

Palavras Chave: Lantanídeos, Luminescência, Transferência de energia, Ligantes β -dicetonatos.

Introdução

Complexos com óxidos de fosfina representam uma importante área na química de coordenação de β -dicetonatos de íons lantanídeos, os quais apresentam propriedades luminescentes singulares desejáveis à uma ampla gama de aplicações [1]. Este trabalho reporta a síntese, caracterização e investigação das propriedades estruturais e luminescentes de β -dicetonatos de íons lantanídeos, $\text{Ln}(\beta\text{-dic})_2(\text{NO}_3)_2$, $\text{Ln}(\text{TTA})_3\text{L}_2$ e $\text{Ln}(\text{DBM})_3\text{L}$, em que $\text{Ln}^{3+} = \text{Sm}^{3+}$ e Eu^{3+} , $\beta\text{-dic} = 2\text{-tenoilltrifluoroacetona}$ (TTA) e dibenzoilmetano (DBM), L = óxido de trifenilfosfina (TPPO), tributilfosfina (TBPO) e trioctilfosfina (TOPO).

Resultados e Discussão

Os espectros de excitação exibem bandas largas associadas às transições $S_0 \rightarrow S_1$ nos ligantes orgânicos, indicando uma transferência de energia intramolecular operativa para os níveis dos íons Ln^{3+} . Os espectros de emissão exibem bandas finas oriundas das transições intraconfiguracionais ${}^4G_{5/2} \rightarrow {}^6H_{5/2,7/2,9/2,11/2}$ e ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_{0,1,2,3,4}$ e são dominados pelas transições hipersensíveis ${}^4G_{5/2} \rightarrow {}^6H_{9/2}$ (~645 nm) e ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_2$ (~612 nm), para os íons Sm^{3+} e Eu^{3+} , respectivamente (Figura 1).

As propriedades fotoluminescentes dos compostos de Eu^{3+} foram investigadas através dos parâmetros de intensidade Ω_2 e Ω_4 , taxas de emissão espontâneas (Arad), tempo de vida de luminescência (τ), eficiência quântica de emissão (η). Os valores mais altos de η foram encontrados para os complexos $\text{Eu}(\beta\text{-dic})_2(\text{NO}_3)_2(\text{L})_2$ na faixa de 56-89%, devido à transferência de energia mais eficiente entre o estado tripleto do ligando orgânico e o nível 5D_0 do íon Eu^{3+} . Os parâmetros de intensidade Ω_2 permanecem praticamente constantes quando o ligando L é alterado, no $\text{Eu}(\beta\text{-dic})_2(\text{NO}_3)_2\text{L}_2$ e $\text{Eu}(\beta\text{-dic})_3\text{L}_2$, os valores de Ω_4 seguem tendências similares.

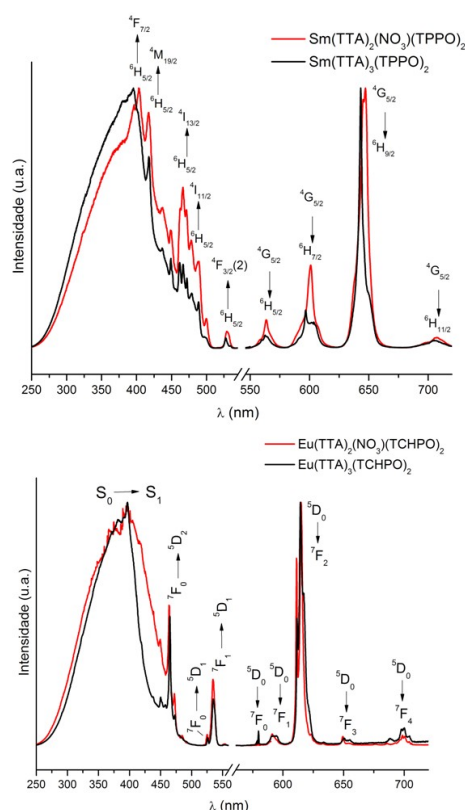


Figura 1. Espectros de excitação e emissão para os complexos $\text{Ln}(\text{TTA})_2(\text{NO}_3)_2\text{L}_2$, $\text{Ln}(\text{TTA})_3\text{L}_2$, à 298 K.

Conclusões

Os resultados obtidos sugerem que estes são potenciais candidatos a atuarem como Dispositivos Moleculares Conversores de Luz.

Agradecimentos

CNPq e CAPES.



Propriedades Fotofísicas de Complexos $[\text{Ln}(\text{R}(\text{CO})\text{CH}(\text{CO})\text{R}')_3(2\text{-Py-NH}(\text{CO})\text{R}')_2)]$

Renato H. M. Galdino^{1,*} (IC), Geórgia B. V. Lima¹ (PG), Flávia A. F. Silva¹ (PQ), Ercules E. S. Teotonio¹ (PQ), Wagner M. Faustino¹ (PQ) *renato_henrique@hotmail.com

¹Universidade Federal da Paraíba, Departamento de Química, João Pessoa-PB, Brasil.

Palavras Chave: Luminescência, Európio.

Introdução

Existe um interesse crescente na síntese de compostos de coordenação de íons de lantanídeos trivalentes^{1,2}. Estes íons têm propriedades luminescentes com amplas aplicações nos campos de dispositivos moleculares de conversão de luz, marcadores luminescentes em imunoenaios, diagnósticos em imagens biomédicas, entre outros. O presente trabalho teve como objetivo estudar as propriedades espectroscópicas de compostos mistos de fórmulas gerais $[\text{Ln}(\text{C}_6\text{H}_5(\text{CO})\text{CH}(\text{CO})\text{R})_3(2\text{-Py-NH}(\text{CO})\text{R}')_2)]$ ou $[\text{Ln}(\text{C}_6\text{H}_5(\text{CO})\text{CH}(\text{CO})\text{R})_3(2\text{-Py-NH}(\text{CO})\text{R}')_2)]$, com Ln = Eu(III) e Gd(III); R, R' = CH₃, CF₃ ou C₆H₅. Todos os compostos foram caracterizados por análise elementar de carbono, hidrogênio e nitrogênio, espectroscopia de absorção na região infravermelha, espectroscopia molecular por reflectância difusa e espectroscopia de emissão e excitação e medidas de tempo de vida.

Resultados e Discussão

Os complexos $[\text{Ln}(\text{BZAC})_3(\text{NA2AP})]$ sendo Ln = Eu e Gd formaram-se na estequiometria proposta, contudo foi observado que os demais complexos apresentaram estequiometria $[\text{Ln}(\text{L})_3(\text{B})_2]$ sendo L = BTF e DBM, e B = NTF2AP e NB2AP. Este fato sugere que a presença do grupo indutivo – CF₃, presente em tais complexos, gera uma diminuição da densidade eletrônica sobre o nitrogênio do grupo piridil e aumento da densidade de carga negativa sobre o oxigênio da carbonila, favorecendo a coordenação monodentada. Os espectros de emissão dos complexos de gadolínio foram utilizados para determinação do estado tripleto dos ligantes. As propriedades fotoluminescentes do íon Eu³⁺ nos complexos foram investigadas a partir dos espectros de excitação, emissão e curvas de decaimento de luminescência. Os espectros de emissão (Fig. 1) desses complexos mostraram, principalmente, bandas finas oriundas das transições intraconfiguracionais- $4f^N \ ^5D_0 \rightarrow ^7F_0, 1, 2, 3, 4$ do íon európio, dominados pela transição

hipersensível $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$ (~612 nm). Com base nos dados espectrais foram determinados os parâmetros de intensidade Ω_2 e Ω_4 , os coeficientes de emissão radiativa (A_{rad}) e não-radiativa (A_{nrad}) e a eficiência quântica de emissão experimental (η) do nível 5D_0 do íon Eu³⁺. Todos os complexos apresentaram valores de η do estado emissor 5D_0 superiores aos correspondentes complexos aquosos.

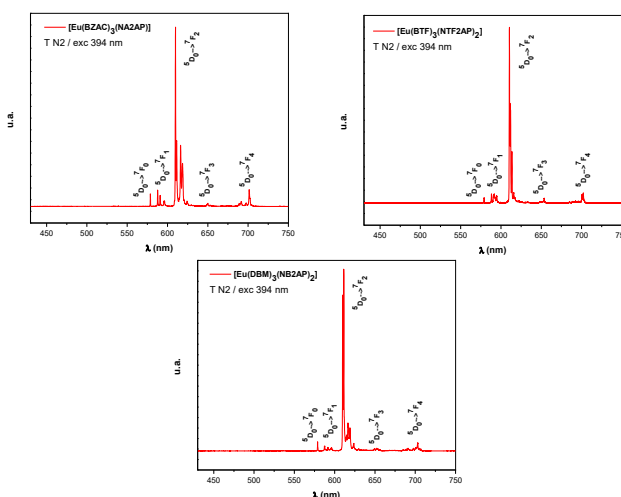


Figura 1 – Espectros de emissão.

Conclusões

Os resultados indicam que a síntese de complexos mistos de Európio com ligantes β -dicetonatos e derivados da 2-aminopiridina seja uma boa estratégia para gerar complexos altamente luminescentes, para possíveis aplicações no desenvolvimento de Dispositivos Moleculares Conversores de Luz eficientes, tais como os desejáveis para biomarcadores.

Agradecimentos

UFPB, CNPq e Capes.

¹ E. E. S. Teotonio, H. F. Brito, C. M. C. F. Felinto, A. C. Kodaira, L. O. Malta, *J. Coord. Chem.* **2003**, *56*, n. 10, 913-921.

² E. E. S. Teotonio, F. A. Silva Jr, D. K. S. Pereira, L. M. Santo, H. F. Brito, W. M. Faustino, M. C. F. C. Felinto, R. H. Santos, R. Moreno-Fuquen, A. R. Kennedy, D. Gilmore, *Inorg. Chem. Comm.* **2010**, *13*, 1391-1395.



Propriedades fotoluminescentes de Ln³⁺-β-dicetonatos com ligantes fosfinóxidos: emissão no infravermelho próximo (NIR)

Paulo R. S. Santos¹ (PG)*, Jandeilson L. Moura¹ (PG), Israel F. Costa¹ (PG), Ercules E. S. Teotonio¹ (PQ)

*roberto.santos.p.s@outlook.com

¹Universidade Federal da Paraíba, Departamento de Química, João Pessoa, PB, Brasil.

Palavras Chave: Lantanídeos, Luminescência no Infravermelho Próximo, Transferência de energia.

Introdução

Os íons lantanídeos trivalentes são conhecidos por suas propriedades ópticas únicas, estreitas bandas de emissão decorrentes das transições intraconfiguracionais 4f-4f e longos tempos de vidas, o que torna esses íons únicos dentre os compostos de coordenação luminescentes e desejáveis a uma série de aplicações [1]. Este trabalho reporta a investigação das propriedades fotoluminescentes de complexos β-dicetonatos de íons lantanídeos, Ln(β-dic)₂(NO₃)L₂, Ln(TTA)₃L₂ e Ln(DBM)₃L na região do infravermelho próximo (NIR), em que Ln³⁺ = Pr³⁺, Nd³⁺, Sm³⁺, Er³⁺ e Yb³⁺, β-dic = 2-tenoiltrifluoroacetona (TTA) e dibenzoilmetano (DBM), L = óxido de trifenilfosfina (TPPO), tributilfosfina (TBPO) e trioctilfosfina (TOPO).

Resultados e Discussão

Os resultados obtidos a partir das análises de titulação complexométrica com EDTA, análise elementar de CHN, espectroscopia de IR (FT-IR) e

análise termogravimétrica (TGA) corroboram as fórmulas propostas. As propriedades fotoluminescentes na região do infravermelho próximo (NIR) foram investigadas a partir dos espectros de excitação e emissão. Os espectros de excitação são caracterizados pela presença de bandas largas associadas às transições centradas nos ligantes orgânicos, sugerindo que esses ligantes atuam como bons sensibilizadores para íons Ln³⁺ que exibem luminescência na região NIR. Os espectros de emissão no NIR dos complexos bis e tris-dicetonato dos íons Pr³⁺, Nd³⁺, Sm³⁺, Er³⁺ e Yb³⁺ apresentam o conjunto de transições intraconfiguracionais característico de cada centro metálico (Figura 1) [1]. As bandas associadas às transições, ¹D₂→¹F₄ (Pr³⁺), ⁴F_{3/2}→⁴I_{11/2} (Nd³⁺), ⁴G_{5/2}→⁶F_{5/2} (Sm³⁺), ⁴I_{13/2}→⁴I_{15/2} (Er³⁺) e ²F_{5/2}→²F_{7/2} (Yb³⁺) exibem intensidade significativamente maiores dominando a intensidade espectral para cada caso.

Figura 1. Espectros de excitação e emissão para os complexos Ln(TTA)₂(NO₃)L₂, Ln(TTA)₃L₂, à 298 K.

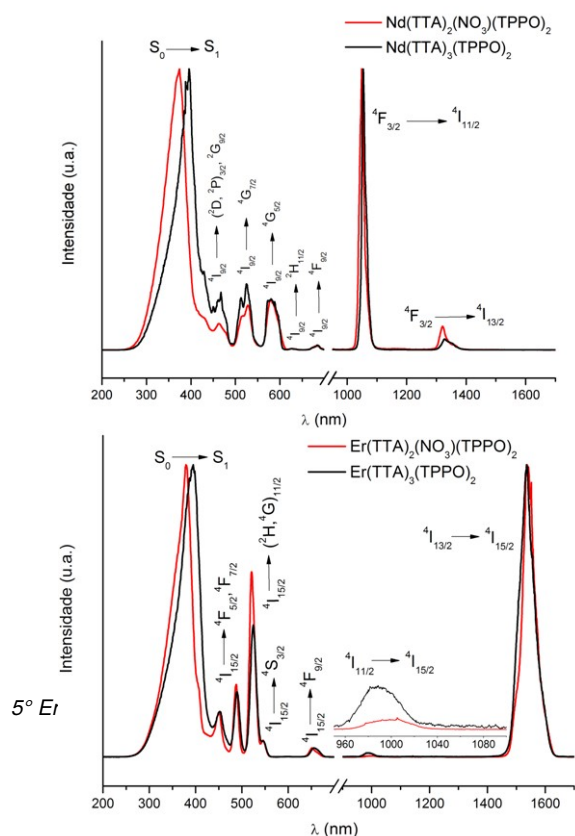
Conclusões

Os complexos dos íons Ln³⁺ (Pr³⁺, Nd³⁺, Sm³⁺, Er³⁺, Yb³⁺) foram sintetizados e caracterizados. Após a excitação em comprimentos de onda de absorção de ligantes β-dic, todos os compostos exibem a luminescência na região do NIR característica do íon Ln³⁺, sensibilizada pelos ligantes orgânicos.

Agradecimentos

CNPq e CAPES.

1. Bünzli, J-CG; *Coord. Chem. Rev.* **2015**, 293-294, 19-47.





Incorporação da clorina metil feoforbídeo *a* em polissiloxanos funcionais

Annaíres de Almeida Lourenço^{1*} (IC), Joaldo Garcia Arruda¹ (PG), Fernando J. V. E. Oliveira² (PQ)
annaireslourenco@gmail.com

Universidade Federal da Paraíba¹, Universidade Federal do Rio Grande do Norte²

Palavras Chave: Siliconas; Hidrossililação; Clorina

Introdução

Materiais híbridos orgânicos inorgânicos são obtidos pela combinação de componentes moleculares orgânicos e inorgânicos, proporcionando as estruturas formadas propriedades melhoradas se comparado com seus percussores, visto que estas são resultantes do sinergismo das propriedades dos dois reagentes de partida [1]. Dentre esses materiais, as siliconas possuem uma posição de destaque por conta de suas características como ser inerte química e biologicamente, possuir uma excelente resistência mecânica e térmica e também por apresentar propriedades ópticas acentuadas como transparência e translucidez. Uma propriedade marcante desses materiais é a capacidade de incorporação de outras estruturas químicas em sua estrutura. Com isso, foi proposto a incorporação da clorina metil feoforbídeo *a*, que é um derivado de porfirina, no filme autossuportado. Tais filmes são preparados a partir da reação de hidrossililação, entre o PMS (fonte do grupo Si-H) e DVB (fonte de insaturações), catalisada pelo caralizador de Karstedt formando ligações Si-C, e é incorporado neles a clorina metil feoforbídeo *a*.

Resultados e Discussão

Através do espectro de infravermelho do filme puro, é observado a eficácia da reação de hidrossililação pela observação em 1260 cm^{-1} e 800 cm^{-1} de bandas típicas referente à ligação Si-CH₃.

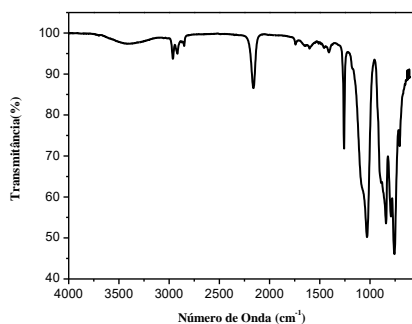


Figura 1. Espectro na região do infravermelho do filme autossuportado puro.

A partir dos espectros apresentado na figura 2, nota-se a presença da clorina metil feoforbídeo *a*, já que neles, tem-se as bandas características da clorina em 400nm e 650nm.

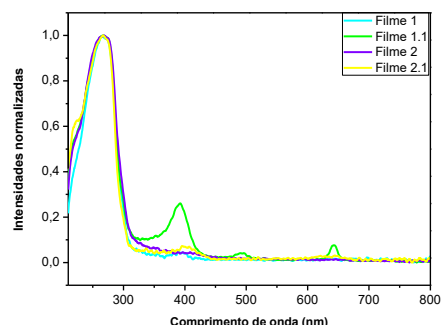


Figura 2. Espectro de reflectância difusa no UV-Vis, apresentando um comparativo entre os filmes.

E o filme incorporado com a clorina passou a apresentar uma emissão de cor avermelhada, característica da clorina indicando a eficácia da reação.



Figura 3. Filme sem e com clorina, respectivamente.

Conclusões

A preparação de siliconas incorporada com sistemas porfirínicos se mostrou muito eficaz o que permite o aperfeiçoamento do método de obtenção para incorporar porfirinas que apresentem aplicações biomédicas comprovadas.

Agradecimentos

CNPq & UFPB

¹L.N. Lewis, *From Sand to silicones: An overview of the chemistry Silicones*. In S. J. Clarson ; J.J. Fitzgerald , M. J. Owen, S. D. Smith , *Silicones and Silicone-Modified Materials*, Washington, DC American Chemical Society , 2000. p. 11-18.



Adsorção de corantes têxteis em materiais híbridos mesoestruturado

Joaldo Garcia Arruda^{1*} (PG), Annaíres de Almeida Lourenço¹ (IC), Fernando J. V. E. Oliveira² (PQ)
joaldojp@hotmail.com

Universidade Federal da Paraíba¹, Universidade Federal do Rio Grande do Norte²

Palavras Chave: *Materiais Híbridos, Filossilicatos, corantes*

Introdução

Os filossilicatos são materiais que apresentam estrutura de lamelas, do qual estão unidos fracamente através de interações do tipo van der Waals e por ligações de hidrogênio. Os materiais híbridos a base de sílica, denominados filossilicatos de níquel, foram preparados na razão Ni/Si 4/3 para formação do tipo talco sintético e funcionalizado com o alcóxissilano 3-aminopropil-trietoxissilano, designado **N**, em seguida modificada com tioureia, sendo as amostras resultados nomeadas F-NT, respectivamente. Através da espectroscopia na região do infravermelho(IV), foi observado as bandas características da rede de silício na região de 1050 cm^{-1} representada pelos grupos siloxano e os estiramentos simétricos e assimétricos do agente sililante **NT** na região 2940 e 765 cm^{-1} para os grupos do alcoxilano e a tioureia respectivamente. As sílicas do tipo Filossilicatos de níquel funcionalizadas, apresentam diversas aplicabilidades no ramo de adsorção de metais e intercalação de moléculas, para o presente projeto foram submetidas a ensaios de adsorção do corante vermelho de remazol RB, sendo esse material fornecido pela Dystar.

Resultados e Discussão

A Figura 1 apresenta o espectro na região do infravermelho para a matriz do filossilicato contendo o grupo **NT**, apresentando indícios de formação da rede de silício e modificação da estrutura com esse grupo, observado em 1050 cm^{-1} e 765 cm^{-1} correspondendo estiramentos Si-O-Si e C=S, respectivamente.

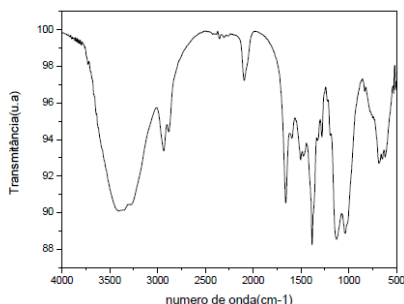


Figura 1. Espectro de absorção na região do infravermelho do F-NT

A Figura 2, apresenta o difratograma de raio-x da amostra **FNT**, evidencia a formação da estrutura lamelar, através do plano basal d_{001} .

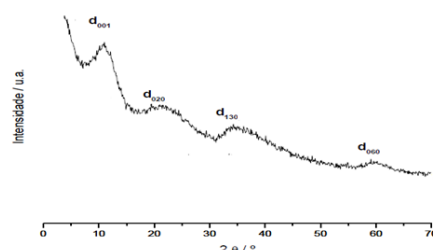


Figura 2. Difratograma da matriz F-NT.

A Figura 3 apresenta a isotérmica de saturação do corante vermelho de remazol, onde pode se concluir que a absorbância diminui significativamente aos 20 min, após esse intervalo, o sistema atinge a saturação.

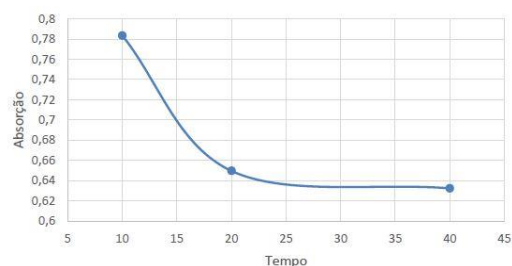


Figura 3. Isotérmica de saturação do corante vermelho na matriz F-NT.

Conclusões

A etapa de obtenção do filossilicato com o agente sililante **NT** foi executada de maneira bem sucedida, e a adsorção do corante vermelho de remazol apresentado apelo ambiental positivo, por ser um processo rápido.

Agradecimentos

CNPq & UFPB

¹ Karine O. Moura and Heloíse O. Pastore, 'Physico-Chemical of Organo-Functionalized Magnesium Phyllosilicate Prepared by Microwave Heating', *Microporous and Mesoporous Materials*, 190 (2014), 292–300.



Síntese e Caracterização de Novos Polímeros de Coordenação Heterobimetálicos.

Lucas Araujo Trajano Silva¹ (IC)*, Fauston Fred da Silva² (PQ). luucasat@gmail.com

Departamento de Engenharia Química, Campus João Pessoa UFPB¹, Departamento de Química, Campus João Pessoa UFPB².

Palavras Chave: Polímeros de Coordenação, Catalisadores, Síntese.

Introdução

O avanço tecnológico dos processos químicos depende, entre outras coisas, do avanço de matérias que possam melhorar o desempenho de reações químicas de interesse. Nesse contexto o trabalho buscou desenvolver novos polímeros de coordenação bimetálicos (3d-3d) que possam ser usados como catalisadores em reações orgânicas [1].

Foram realizadas sínteses por cristalização aberta em condições ambientes com acetato de cobre II e o ácido iminodiacético proporção 1:1, juntamente com dopagens de acetato de cobalto em proporções de 10%, 30% e 50%. As amostras obtidas a partir das dopagens de cobalto apresentaram uma segunda fase cristalina, dependendo da concentração adicionada. Para a caracterização dos complexos foram utilizadas as técnicas de difração de raios-X de pó, espectroscopia de absorção no infravermelho e análise térmica.

Resultados e Discussão

Os compostos obtidos se apresentaram na forma de cristais azuis, perdendo sua intensidade de acordo com adição de cobre. O procedimento utilizado foi similar ao da literatura [2], formando uma fase cristalina $[\text{Cu}(\text{IDA})(\text{H}_2\text{O})_2]$. Mostrado na Fig. 1.

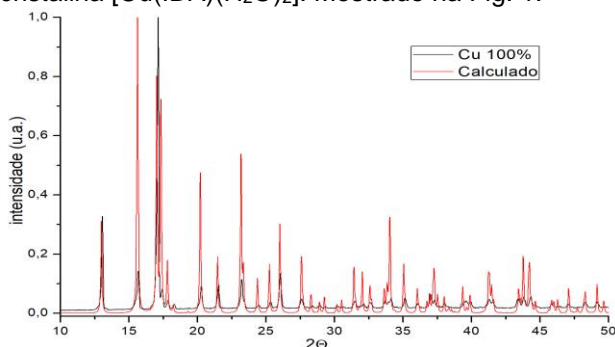


Figura 1. Difração de pó do Cu-IDA e do arquivo CIF obtido pela literatura.

Com o espectro vibracional a seguir, Fig. 2, pode-se observar a uma mudança no perfil com o aumento de Co^{2+} .

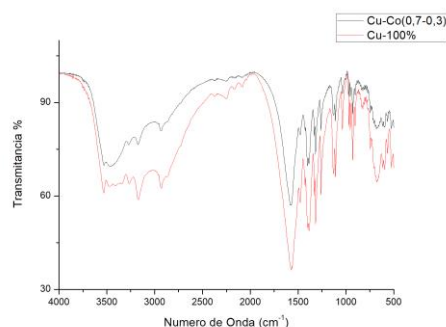


Figura 2. Espectro de infravermelho Cu 100% comparado Cu 70%.

Com o aumento da concentração de cobalto adicionado no complexo ocorreu alteração na estrutura cristalina desejada que foi obtida na amostra de 100% cobre, no sistema ortorrômbico com grupo espacial $Pbca$ [2]. Na difração ocorreu um aumento nos picos indicando uma segunda fase cristalina, nas análises de espectroscopia ocorreu um deslocamento nas bandas sugerindo que o novo metal foi complexado. Com o aumento na concentração de cobre observou uma maior estabilidade térmica.

Conclusões

Foram obtidos compostos contendo diferentes concentrações de cobalto e cobre, entretanto o aumento da percentagem do segundo metal provocou o aparecimento de uma segunda fase cristalina.

Agradecimentos

Ao LACOM pela colaboração nas análises e ao CNPQ pelo apoio financeiro.

¹ Wang, C-C., Chen, H-C., Bin, H-H., Chen, C-Y. *Peroxidation of Benzaldehyde Catalyzed by Cobalt(II)-Chelated Copolymer*. *Polymers for Advanced Technologies*, 14, 2003, 349-354

² da Silva, F. F. *Ligantes Não Convencionais como Precursores de Novos Complexos e Redes de Coordenação*. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Pernambuco, 2014.



BaSnO₃:Cu²⁺ obtido pelo método Pechini Modificado aplicado na fotodegradação de um corante azo

Débora Luísa Rosendo Tomé de Miranda* ¹ (PG), Danniely de Melo Ribeiro ² (PQ), Ieda Maria Garcia dos Santos ¹ (PQ)

¹Universidade Federal da Paraíba. LACOM – UFPB.

²Universidade Estadual da Paraíba- UEPB

deborarosendo@hotmail.com

Palavras Chave: Método Pechini modificado, atividade fotocatalítica, dopagem, estanato de bário.

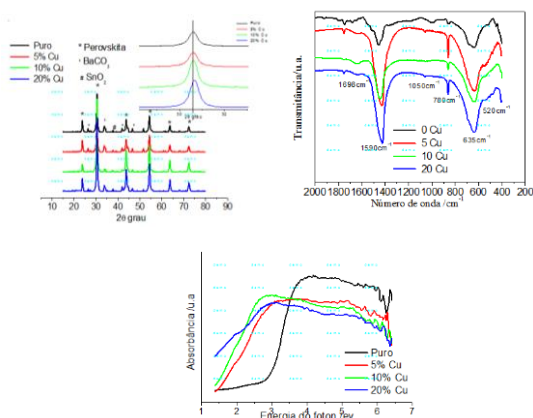
Introdução

Diante do cenário de lançamento de águas contaminadas com resíduos industriais no ambiente, faz-se imprescindível o desenvolvimento de métodos para o tratamento destes efluentes. A fotocatalise heterogênea vem recebendo atenção considerável dos pesquisadores [1-2]. Entre os catalisadores, podemos destacar o Estanato de Bário, que vem recebendo atenção especial tanto por suas propriedades fotocatalíticas, quanto adsorptivas.

Resultados e Discussão

Foram sintetizados através do Método Pechini Modificado, um procedimento que já é previamente relatado na literatura [4] os catalisadores BaSnO₃ e BaSnO₃:Cu²⁺, nas proporções de 5%, 10% e 20% de cobre nas dopagens. Através das caracterizações realizadas, foi possível observar, tanto na amostra pura, como em todos os percentuais de dopagem a formação da estrutura perovskita cúbica. Foram realizados testes de DRX, Infravermelho e UV- Visível, mostrados nas figuras abaixo.

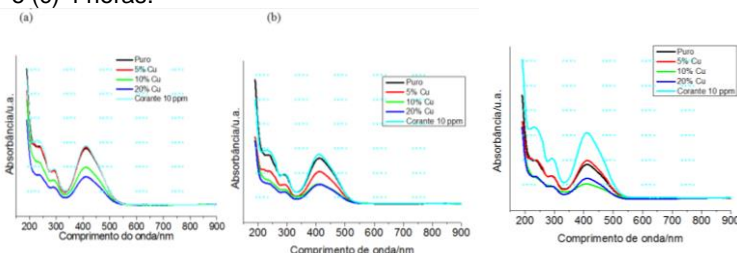
Figura 1. Caracterizações das amostras de BaSnO₃, BaSn_{0,95}Cu_{0,05}O₃, BaSn_{0,90}Cu_{0,10}O₃, BaSn_{0,80}Cu_{0,20}O₃, calcinadas a 700°C. (a) DRX (b) Infravermelho (c) UV-Visível



Foram realizados os testes fotocatalíticos e observadas às bandas principais do corante Remazol Amarelo Ouro.

Através da avaliação por meio do UV-Visível foi possível observar a diminuição nas bandas, que indica a degradação do corante. Com o aumento do percentual de dopagem, a diminuição mostrou-se mais acentuada, indicando que a inserção de Cobre no sistema leva a um aumento da sua atividade fotocatalítica, como pode ser observado na Figura 2.

Figura 2. Espectros de absorção na região do UV-Visível da solução do corante RNL, antes e após a fotocatalise em diferentes tempos de radiação: (a) 1 hora; (b) 2 horas e (c) 4 horas.



Conclusões

- As análises espectroscópicas de UV-Vis demonstraram que o procedimento de fotodegradação na presença dos catalisadores mostrou-se eficiente na diminuição nas bandas de absorção da solução do corante RNL, com resultados satisfatórios.
- A adição do cobre na estrutura da perovskita promoveu uma maior descoloração do corante, devido à formação de defeitos como também a excelente propriedade oxi-redox do cobre.

Agradecimentos



¹ Malato, S.; Blanco, J.; Campos, A.; Cáceres, J.; Guillard, C.; Herrmann, J. M.; Fernández-Alba, A. R. "Effect of operating parameters on the testing of new industrial titania catalysts at solar pilot plant scale". Applied Catalysis B, 42: 249-357, 2003.

² M. Abu Tariq, M. Faisal, M. Saquib, M. Muneer. Heterogeneous photocatalytic degradation of an anthraquinone and a triphenylmethane dye derivative in aqueous suspensions of semiconductor, Dyes Pigments, 76, 358–365, 2008.

⁴ G. L. Lucena; J. J. N. Souza; A. S. Maia; L. E. B. Soledade; E. Longo; A. G. Souza; I. M. G. Santos. New methodology for a faster synthesis of SrSnO₃ by the modified Pechini method. Cerâmica, 59 (2013) 249-253



Complexos de Cobre e Cobalto com Novo Ligante Macrocíclico como Potenciais Radiofármacos.

Carolina de Faria Maranhão Ayres (IC)¹, Ulrich Abram(PQ)², Victor Marcelo Deflon (PQ)³, Rafaela Bernardo Provazi Pesci* (PQ)¹ *rafa_ppesci@yahoo.com.br

- 1- Departamento de Química, CCEN, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa (PB).
- 2- Instituto de Química e Bioquímica, Universidade Livre de Berlin, Berlin (GE).
- 3- Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos (SP).

Palavras Chave: *Macrociclo, medicina nuclear, derivado cyclam, estrutura cristalina.*

Introdução

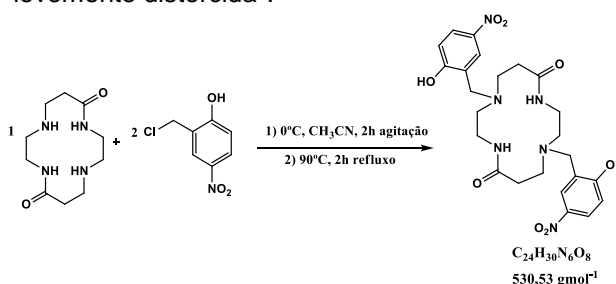
Entre os vários elementos que possuem radioisótopos disponíveis para aplicação em medicina nuclear, o cobre oferece uma boa seleção tanto para terapia quanto imagem^{1,2}. Diversos isótopos de cobalto são importantes em medicina nuclear nas áreas de diagnóstico, monitoração e radioterapia³. Ligantes macrocíclicos derivados do cyclam formam complexos estáveis com diversos íons metálicos e possibilitam a formação de ligantes N-funcionalizados hexadentados^{4,5} que permitem o encapsulamento do metal⁶. O presente trabalho consiste na síntese e na caracterização de um novo ligante macrocíclico derivado do cyclam e de seus complexos de cobre e cobalto.

Resultados e Discussão

Um novo ligante macrocíclico **H₄L** derivado do cyclam (Esquema 1) foi satisfatoriamente sintetizado e caracterizado por espectroscopia na região do infravermelho, ressonância magnética nuclear, espectrometria de massa e difração de raios X.

Após completa caracterização do ligante, foram conduzidas reações com os precursores de cobalto (II) (CoCl₂·6H₂O) e cobre (II) (CuCl₂) dando origem a dois novos compostos. Ocorreu a oxidação do cobalto e este complexou com o macrociclo formando o complexo neutro de cobalto (III) [Co(HL)] que foi devidamente caracterizado por espectroscopia na região do infravermelho, ressonância magnética nuclear, espectrometria de massas e difração de raios X (figura1). *MS-ESI*: (587,13 [M⁺], 609,11 [M-H + Na]⁺, [M-H+K]⁺). Obteve-se um complexo de Cu(II) [Cu(H₂L)] que foi

caracterizado por IV, espectrometria de massas e EPR. *MS-ESI*: 592,13 [M+H]⁺, 614,11 [M+Na]⁺, 630,09 [M+K]⁺. O espectro de EPR do complexo de cobre (II) (Figura 2) é caracterizado pelo valor de g = 2,119, condizente com uma geometria octaédrica levemente distorcida⁷.



Esquema 1-Síntese do novo ligante macrocíclico (H₄L = 1,8-bis(2-hidróxi-5nitrobenzil)-1,4,8,11-tetraazociclotetradecano-5,12-diona

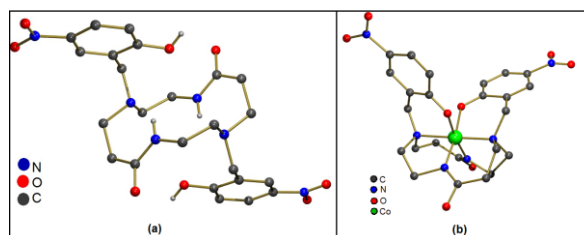


Figura 1- Estrutura cristalina e molecular do ligante H₄L sintetizado (a) Estrutura cristalina e molecular do complexo [Co(HL)] (b).

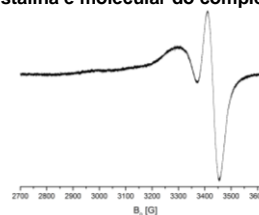


Figura 2- Espectro de EPR obtido em DMSO, a₀= 87,5G T=298K, B₀= 3300G.

Conclusões

Um ligante macrocíclico inédito e dois novos complexos foram satisfatoriamente sintetizados e caracterizados. Ambos apresentam potencial aplicação em medicina nuclear e serão realizados estudos de marcação com radioisótopos adequados.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPESP

¹ Blower, P.J., Lewis, J.S., Zweit, J. *Nucl. Med. Biol* (1996) 23, 957.

² Wadas, T.J.; Wong, E.H.; Weisman, G.R. *Current Phar. Design* (2007) 13, 3-16.

³ Burgess, J.; Fawcett, J.; Llewellyn, M.A.; Parsons, S.A., Russel, D. R. *Transition Metal Chemistry* (2000) 25, 541-546.

⁴ Nirmala, G.; Rahiman, A. K.; Sreedaran, S.; Jegadeesh, R.; Raaman, N.; Narayanan, V. *Polyhedron* (2011) 106-113.

⁵ Delgado, R.; Félix, V.; Lima, L. M. P.; Priced, D. W. *Dalton Trans.* (2007) 26, 2734-2745.

⁶ Marques, F.; Gano, L.; Campello, M. P.; Lacerda, S.; Santos, I.; Lima, L. M. P.; Costa, J.; Antunes, P.; Delgado, R. *J. Inorg. Biochem.* (2006) 100, 270.

⁷ Massabni, A. C.; Corbi, P.P., Melnikov, P.; Zacharias, M.A.; Rechenberg, H.R. *J. Braz. Chem. Soc.* (2005), 16, 718-722



Impacto de Aminoácidos como Ligantes Não Iônicos na Luminescência de Complexos Ternários de Európio.

Douglas G. Silva^{1*}(IC), Anderson I. S. Silva¹(PG), Simone. M. C. Gonçalves¹(PQ).

¹ Departamento de Química Fundamental, Universidade de Federal de Pernambuco.

E-mail: douglas.quimicaufpe@gmail.com.

Área: Química inorgânica.

Palavras Chave: Aminoácidos, Luminescência, Complexos de Európio.

Introdução

Os aminoácidos desempenham papéis biológicos importantes, como a histidina (His) que é utilizada na biossíntese de proteínas^{1,2} e fenilalanina (Phe) utilizada na fabricação de produtos alimentares³. Ambos os aminoácidos His e Phe possuem sítios capazes de interagir com o íon trivalente de európio, assim formando complexos luminescentes, os quais possuem várias aplicações, como em LED⁴, dispositivos ópticos eletrônicos⁵, filmes poliméricos fotoativos⁶, etc. Neste trabalho, avaliamos o impacto dos aminoácidos His e Phe como ligantes não iônicos na luminescência de complexos ternários de európio. Nesse sentido, sintetizamos seis novos complexos do tipo $[\text{Eu}(\beta)_3(\text{L-His ou L-Phe})_2]$, onde β , são os ligantes iônicos que podem ser 4,4,4-trifluor-1-fenil-1,3-butanodiona (BTFA), 1-(2-tenoil)-3,3,3-trifluoracetona (TTA) ou 1,3-difenilpropano-1,3-diona (DBM).

Resultados e Discussão

A Tabela 1 mostra os valores de eficiência quântica, η , obtidos a partir de espectros de emissão e tempo de vida, para todos os seis complexos de európio sintetizados neste trabalho.

Tabela 1. Valores medidos de eficiência quântica, η .

Complexo	η (%)
$[\text{Eu}(\text{BTFA})_3(\text{L-His})_2]$	34
$[\text{Eu}(\text{BTFA})_3(\text{L-Phe})_2]$	28
$[\text{Eu}(\text{TTA})_3(\text{L-His})_2]$	28
$[\text{Eu}(\text{TTA})_3(\text{L-Phe})_2]$	19
$[\text{Eu}(\text{DBM})_3(\text{L-His})_2]$	15
$[\text{Eu}(\text{DBM})_3(\text{L-Phe})_2]$	12

Na tabela 1 observamos que todos os complexos de L-histidina são mais luminescentes quando comparados com os correspondentes complexos de L-fenilalanina. Resultados semelhantes podem ser verificados para os complexos com BTFA e TTA em relação aos complexos de DBM. Isso pode ser explicado através da capacidade do ligante de ser

uma antena eficiente no processo de luminescência. Nesse sentido, podemos inferir que o ligante não iônico L-His é uma antena mais eficiente quando comparado com o ligante não iônico L-Phe, bem como os ligantes iônicos BTFA e TTA são antenas mais eficientes quando comparados com o ligante iônico DBM.

Conclusões

Neste trabalho pudemos observar que o aminoácido L-histidina é uma antena mais eficiente quando comparado com o aminoácido L-fenilalanina, e que os complexos que contêm os ligantes BTFA e TTA possuem valores de eficiência quântica que se sobressaem quando comparados com os complexos que possuem o ligante DBM.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao PIBID, ao PET/MEC, ao CNPq, à CAPES e à FACEPE(PRONEX).

¹Z. Rashid, R. Ghahremanzadeh, M.-R. Nejadmoghaddam, M. Nazari, M.-R. Shokri, H. Naeimi, et al, J. Chromatogr. A. 1490 (2017) 47–53.

²K. Salimi, D.D. Usta, İ. Koçer, E. Çelik, A. Tuncel, RSC Adv. 7 (2017) 8718–8726.

³A.M. Holwerda, K. Lenaerts, J. Bierau, W.K.W.H. Wodzig, L.J.C. van Loon, Appl. Physiol. Nutr. Metab. (2017) apnm-2016-0522.

⁴SHAO, G.; LI, Y.; FENG, K.; GAN, F.; GONG, M. Actuators B Chem. 173, 692–697, 2012.

⁵WANG, G.; PENG, Q.; LI, Y. Acc. Chem. Res. 44, 322–332, 2011.

⁶I. T. S. Garcia, P. V. Ribeiro, D. S. Corrêa, I. M. N da Cunha, N. L. V. Carreno, E. C. Moreira, F. S. Rodembusch. Applied Surface Science. 2011.



Síntese e caracterização de novos compostos de coordenação de Zn(II) e Ni(II) com ligantes do tipo Melofen.

Edvaldo A. da Silva Júnior¹ (PG), Wanessa Oliveira (IC), João Victor (IC), Juliana A. Vale(PQ), Sherlan S. Lemos, Jailton Ferrari¹ (PQ)

¹Universidade Federal da Paraíba, Departamento de Química, CCEN – UFPB, João Pessoa-PB, Brasil
edvaldo.alvesufpb@gmail.com

Palavras Chave: ácido de Meldrum, níquel, zinco, Melofen, base de Schiff.

Introdução

Compostos de coordenação de metais de transição com ligantes do tipo base de Schiff são bastante difundidos na literatura em decorrência de suas aplicabilidades em estudos químicos, eletroquímicos e biológicos¹. Dentre as bases de Schiff, a N,N(bis-salicilideno)etilenodiamina talvez seja uma das mais conhecidas e estudadas sendo, muitas vezes, reconhecida apenas pelo acrônimo Salen (Figura 1). Considerando que os complexos do tipo Salen/Salofen são estruturalmente assemelhados aos novos complexos derivados do ácido de Meldrum (AM), estes passaram ser denominados de complexos do tipo Melen/Melofen.² Em conexão com este tópico, descrevemos aqui a obtenção de complexos inéditos a partir dos derivados aminometilênicos do AM.

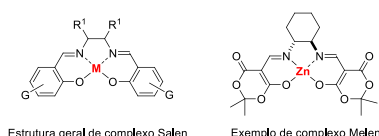
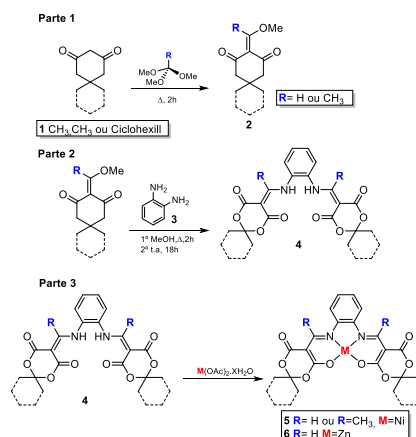


Figura 1. Complexo contendo ligantes BS

Resultados e Discussão

As sínteses dos complexo M-Melofen iniciaram-se pela preparação do acceptor Michael (**2a** ou **2b**) a partir da reação entre **1** e trimetilortoformiato ou trimetilortoacetato, conforme mostrado no Esquema 1. Adição da *orto*-fenilenodiamina **3** ao acceptor de Michael **2** (**2a** ou **2b**) permitiu acessar os inéditos ligantes **4**. Seguindo o protocolo de Montalban,³ as reações dos ligantes do tipo **4** com $M(OAc)_2 \cdot XH_2O$ forneceram os complexos **M-Melofen** (Esquema 1). Os estudos comparativos dos espectros de IV e RMN de H^1 entre os ligantes e os seus respectivos complexos do **M-Melofen** corroboraram as estruturas propostas para os compostos de coordenação.⁴ Adicionalmente, para o complexo **Ni-Melofen-Ciclohexil, Ciclohexil** realizou-se um estudo eletroquímico inicial empregando voltametria cíclica de onda quadrada e pulso diferencial como

procedimentos. Nestes estudos foram encontrados sinais que indicam a presença desta espécie em um processo oxidativo irreversível e, por conta disso, estudos adicionais estão em curso no sentido de entender-se mais precisamente o perfil dos processos eletroquímicos que lhe ocorrem.



Esquema 1. Rota de síntese dos complexos M-Melofen

Conclusões

Este trabalho descreve a síntese, caracterização e estudos eletroquímicos dos novos complexos derivados dos ligantes do tipo **4** do AM. Aplicações destes complexos desta nova família de compostos estão em desenvolvimento e estudos eletroquímicos em nosso grupo de pesquisa.

Agradecimentos

Agradecemos ao LMCA e ao DQ da UFPB pelo apoio concedido. E.A.S.J agradece a CAPES pela bolsa concedida.

¹ M. . Muhammad, S. Afzal, A. Zareen, Q. Rumana, M. Bushra, T. Misbah, *App. Org Chem*, **2011**, 25(1), 61-69

² Mederos, A.; Dominguez, S.; Hernandez-Molina, R.; Sanchiz, J.; Brito, F. *Coord. Chem. Ver.* **1999**, 193-194, 857.

³ Para um exemplo ver: Chang, K.-H.; Huang, C.-C.; Liu, Y.-H.; Hu, Y.-H.; Chou, P.-T.; Lin, Y.-C. *Dalton Trans.* **2004**, 1731.

⁴Montalban, A. G.; Alonso, J.; White, A. J. P.; Willians, D. J. *Tetrahedron Lett.* **2010**, 51, 5543.



Interferência de Cloretos e Sulfatos no Processo H_2O_2 /Uv solar na fotodegradação do Corante Azul de Metileno

Adrielle Maria Marques Carneiro* (IC), Maria Luisa Palitot Remigio Alves (IC), Samara Teixeira Pereira (PG), Shara Sonally Oliveira de Sousa (IC), Romildo Henrique dos Anjos Júnior (TC), Elisângela Maria Rodrigues Rocha (PQ).

Universidade Federal da Paraíba, Campus I, João Pessoa, PB. adriellemaria0987@gmail.com*

Palavras Chave: Fotocatálise; H_2O_2 /UV; Azul de Metileno; Cloretos; Sulfatos;

Introdução

A presença de elevadas concentrações de sais (cloretos, sulfatos, entre outros) é comum em águas residuárias e em esgotos domésticos, podendo interferir na degradação de compostos-alvo em um processo de tratamento baseado na decomposição do H_2O_2 , como na reação de Fenton e H_2O_2 ^{1,2}. Diante disso, o presente trabalho teve como objetivo analisar a interferência dos ânions cloretos (Cl^-) e sulfatos (SO_4^{2-}) no processo oxidativo avançado, por H_2O_2 /UV na degradação do corante azul de metileno (AM). Foram realizados três experimentos para estudo da interferência dos ânions Cl^- e SO_4^{2-} , em diferentes concentrações utilizando condição otimizada do processo em testes anteriores: tempo de exposição (180 min), $[H_2O_2] = 170.07 \text{ mg L}^{-1}$, pH (5) e $[Azul \text{ de Metileno}] = 10 \text{ mg L}^{-1}$. No experimento 1 utilizou-se a concentração máxima desses ânions ($250 \text{ mgL}^{-1} Cl^-$ e $250 \text{ mgL}^{-1} SO_4^{2-}$) recomendada pela Resolução Conama 357/05 disponível em águas doces de classe 1 e 3. No experimento 2, investigou-se concentrações superiores (500 mgL^{-1} , 1000 mgL^{-1} e 2000 mgL^{-1}) para Cl^- e SO_4^{2-} e, posteriormente, no 3º experimento, testou-se concentrações inferiores ao limite supracitado (25 mgL^{-1} , 50 mgL^{-1} , 100 mgL^{-1} , 200 mgL^{-1} e 250 mgL^{-1}) para Cl^- e SO_4^{2-} . Ao final dos experimentos foram realizadas as análises de remoção de cor e das concentrações do azul de metileno, de Cl^- e de SO_4^{2-} e o peróxido residual.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados das melhores resultantes dos experimentos das 1, 2 e 3 estão expostos na tabela 1.

Tabela 1. Variáveis analisadas após o processo H_2O_2 /UV solar dos experimentos 1, 2 e 3.

Experimento	Variáveis					pH
	Cl^-	SO_4^{2-}	H_2O_2 residual (%)	Remoção de AZM (%)	Descoloração (%)	
1	250-	250-	51	97	97	4,6

2	<250-	-	46,4	82	79	4,2
3	<250-	-	49	99	96	5,6

Experimento 1: Cl^- e $SO_4^{2-} = 250 \text{ mgL}^{-1}$. Experimento 2: Cl^- e $SO_4^{2-} = 500 \text{ mgL}^{-1}$, 1000 mgL^{-1} e 2000 mgL^{-1} . Experimento 3: Cl^- e $SO_4^{2-} = 25 \text{ mgL}^{-1}$, 50 mgL^{-1} , 100 mgL^{-1} , 200 mgL^{-1} e 250 mgL^{-1} .

Esses resultados mostram que há a possibilidade de uma baixa interferência dos ânions cloretos e sulfatos na degradação do corante AM. Alguns trabalhos observaram que na presença de íons sulfato e irradiação, a taxa de decomposição de H_2O_2 é inibida proporcionalmente ao aumento da concentração de íons sulfato. Enquanto na presença de cloreto e irradiação, a taxa de decomposição é favorecida quando maiores concentrações de íons cloretos são utilizadas².

A figura 1 mostra a comparação visual da remoção da cor das amostras.

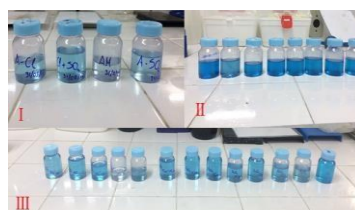


Figura 1: I - Análise visual da descoloração das amostras do processo de fotocatalise solar (H_2O_2 /UV) nos experimentos 1 (I), 2 (II) e 3 (III).

Conclusões

Os processos oxidativos avançados H_2O_2 /UV solar se mostraram eficientes, em nível de bancada, na degradação do azul de metileno, chegando à um percentual de remoção máxima (98,94%) para a amostra com ausência de $[Cl^-]$ e na presença de $[SO_4^{2-}]$, em concentração de 50 mgL^{-1} , minerais, e ainda utilizar uma fonte de radiação como catalisador disponível e limpa, que é a luz solar.

Agradecimentos

Ao CNPq pelo apoio financeiro e ao Laboratório de Saneamento – CT/UFPB.